



von der Fakultät Maschinenwesen
der Technischen Universität Dresden
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktoringenieur (Dr.-Ing.)
genehmigte Dissertation

Holzverbrennung in Kaminöfen mit Keramikfilter - experimentelle Untersuchungen und mathematische Modellierung

von
Dipl.-Ing. Ulf Sénéchal
geboren am 03.09.1976 in
Frankfurt (Oder)

Gutachter:

Prof. Dr. rer. nat. habil. Cornelia Breitskopf

Prof. Dr.-Ing. habil. Tobias Zschunke

Vorsitzender der Promotionskommission:

Prof. Dr.-Ing. André Wagenführ

Tag der Einreichung: 11.02.2013

Tag der Verteidigung: 03.12.2013

Kurzzusammenfassung

Zur Verringerung von Schadstoffemissionen werden in Kaminöfen oft Keramikfilter integriert, die Staub und Ruß aus dem Abgas entfernen sollen. Die Filter beeinflussen jedoch die strömungsmechanischen, energetischen und chemischen Vorgänge im Feuerraum. Für die Auslegung und die praktische Anwendung der Filter ist die Kenntnis der Einflussgrößen und deren Umfang nötig.

Mit Hilfe von experimentellen und numerischen Untersuchungen wurden die Stoff- und Energietransportvorgänge von zwei Kaminöfen charakterisiert. Zur Bestimmung der Massenabnahme von Holzscheiten kam eine neue, praktisch leicht umsetzbare Methode, basierend auf einer Schockkühlung mit flüssigem Stickstoff, zum Einsatz. Parallel dazu wurde die Massenabnahme der Holzscheite mit Hilfe einer Online-Massenbestimmung mittels Waage aufgezeichnet und ein Verfahren zur Bestimmung der Abbrandkinetik entwickelt. Die Schwierigkeiten der messtechnischen Erfassung und Auswertung der instationären Vorgänge wurden dargestellt und diskutiert.

Für die zwei Kaminöfen sind numerische Simulationen mit der Software ANSYS CFX erstellt worden, die weitgehend auf realen Geometrien beruhen. Vergleichende null- und eindimensionale Simulationen mit unterschiedlichen Reaktionsmechanismen und gasförmigen Brennstoffen wurden realisiert und hinsichtlich ihrer Eignung für die Berechnung von Kaminöfen untersucht.

Nach erfolgter Validierung wurde ein parametrisches Simulationsmodell eines Kaminofens erstellt. Mit diesem wurde eine Parameterstudie zur Untersuchung der Veränderung der Zielgrößen Heizleistung, Kohlenmonoxid- und Rußkonzentration sowie Gesamt- und Sekundärluftmassenstrom in Abhängigkeit der Parameter durchgeführt.

Abstract

Reduction of pollutant emissions from wood-burning stoves is sometimes achieved by integrating ceramic filters to remove particulate matter and soot. These filters affect all processes of fluid mechanic, energy transport and chemical reactions at the same time. For designing and practical applications of the filters the impact of those filters on the system variables must be known. Experimental and numerical investigations were used to characterize heat and mass transport of two wood-burning stoves.

For estimating the decrease of mass of logs a new, easy-to-use method based on quenching with liquid nitrogen was applied. Additionally, the mass was measured online during combustion with a balance. A procedure for determining the kinetics of the burning process was developed. Difficulties of measurements and analysis of transient processes are shown and will be discussed.

The numerical simulations of the two wood-burning stoves were done with the software ANSYS CFX with nearly real geometric properties. For comparison zero- and one-dimensional simulations with different reaction mechanism and fuels were carried out and tested for suitability in the simulations of wood-burning stoves.

After performing the validation a parametric simulation model of a wood-burning stove was created. This model was used to investigate the variation of the target values heating power, concentration of carbon monoxide and soot and the mass flow of overall and secondary air depending on the geometric parameters.

Teile dieser Arbeit wurden bereits veröffentlicht in:

U. Sénéchal, T. Zschunke, „Numerische Berechnungen von scheitholzbefeuerten Kaminöfen“, Aktuelle Beiträge zur Technischen Thermodynamik, Energietechnik und Fernwärmeversorgung“, Sonderveröffentlichung der AGFW, Frankfurt am Main, 2011

U. Sénéchal, T. Zschunke, „Numerische Berechnungen von scheitholzbefeuerten Kaminöfen“, 4. Fachkolloquium Feuerstätten/Abgasanlagen am Fraunhofer-Institut für Bauphysik in Stuttgart, September 2010

Danksagung

Diese Arbeit entstand in den Jahren 2009 bis 2012 am Institut für Energietechnik der Technischen Universität Dresden an der Professur für Technische Thermodynamik. An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Mein besonderer Dank gilt Frau Prof. Dr. rer. nat. habil. Cornelia Bretkopf sowie Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Tobias Zschunke für die Übernahme der Betreuung und Begutachtung dieser Arbeit sowie zahlreiche wertvolle Hinweise und Ratschläge.

Ich möchte mich weiterhin bei Herrn Dr. Andreas Kalisch, Frau Vera Gräff und dem ganzen Team der Arbeitsgruppe Feuerstätten und Abgasanlagen des Fraunhofer-Institutes für Bauphysik für die Unterstützung bei den Messungen bedanken. Ebenso danke ich Herrn Jörg Adler vom Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien und Systeme für die strömungstechnische Charakterisierung der Keramikfilter.

Darüber hinaus gilt mein Dank Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Achim Dittmann, Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Jörg Huhn sowie Herrn Dr.-Ing. Jens Meinert für die langjährige Zusammenarbeit, das freundschaftliche Verhältnis und die Möglichkeit zur Arbeit am Lehrstuhl.

Mein herzlicher Dank gilt nicht zuletzt meiner Lebensgefährtin Ulrike und meiner Familie, die mir bei der Anfertigung dieser Arbeit zur Seite standen.

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis	ix
Abkürzungsverzeichnis	xiii
Abbildungsverzeichnis	xv
Tabellenverzeichnis	xix
1 Einführung und Stand des Wissens	1
1.1 Begriffe und Motivation zur Untersuchung von Kaminöfen	1
1.2 Stand der experimentellen Untersuchungen von Kaminöfen	2
1.3 Stand der numerischen Simulation von Kaminöfen	3
1.4 Stand der CFD-Modellierung von Verbrennungsvorgängen fester Brennstoffe	5
1.4.1 Allgemeines	5
1.4.2 Phasen- und Transportmodell	6
1.4.3 Reaktionsmechanismen und Reaktionskinetik	9
1.4.3.1 Einführung	9
1.4.3.2 Homogene Gasphasenreaktionen	9
1.4.3.3 Heterogene Reaktionen und Feststoffreaktionen	16
1.4.4 Mittelungsmethoden bei turbulenter Strömung	16
1.4.5 Thermische Strahlung	18
1.4.5.1 Einführung	18
1.4.5.2 Methoden zur Lösung der Strahlungstransportgleichung . .	22
1.4.5.3 Strahlungseigenschaften der Gase	23
1.4.6 Zusammenfassung	26
1.5 Einordnung und Inhalt der Arbeit	27
2 Experimenteller Teil	29
2.1 Vorbemerkungen	29
2.2 Charakterisierung des Brennstoffes	30
2.3 Messung der Gaszusammensetzung	31
2.4 Temperaturmessungen	32
2.5 Messung des Verlaufes der Brennstoffmasse	34
2.5.1 Online-Messung der Massenabnahme des Brennstoffes	34
2.5.2 Offline-Messung der Massenabnahme des Brennstoffes	34
3 Mathematische Modellierung	37
3.1 Voruntersuchungen zur Evaluierung der Modelle und Randbedingungen	37
3.1.1 Verbrennungsrechnungen	37
3.1.2 Verbrennungskinetik, Reaktionsmechanismus und Ersatzbrennstoff . .	40
3.1.3 Bestimmung des äußeren Wärmeübergangskoeffizienten	48

3.2	Basisgleichungen zur numerischen Strömungssimulation	50
3.2.1	Erhaltungsgleichungen	50
3.2.2	Turbulenzmodell	51
3.2.3	Stoffdaten	54
3.2.4	Verbrennungsmodell	55
3.2.5	Modell für Filter und Glutbett	56
3.2.6	Verweilzeitverteilung	56
3.2.7	Modell für Rußbildung	57
3.2.8	Modell für thermische Strahlung und Spektralmodell (Strahlungseigenschaften)	58
3.3	Geometrie, Diskretisierung und Randbedingungen der numerischen Simulationen zur Validierung	64
3.3.1	Geometrischer Aufbau und Rechengitter	64
3.3.2	Randbedingungen	67
3.4	Untersuchungen zur numerischen Lösung und Abschätzung von Modelleinflüssen	69
3.4.1	Einstellungen und Besonderheiten des Lösungsverfahrens	69
3.4.2	Untersuchung des Einflusses von Modellen und Modellparametern . .	71
3.4.2.1	Nutzung eines Turbulenzmodells sowie Veränderung der turbulenten Prandtl- und Schmidt-Zahl	71
3.4.2.2	Verwendung eines alternativen Reaktionsmechanismus	72
3.5	Parameterstudie	73
3.5.1	Numerische Simulationen zur Optimierung der Geometrie	73
3.5.2	Zusätzliche numerische Simulationen zur Untersuchung von Detailfragen	75
4	Ergebnisse und Diskussion	77
4.1	Ergebnisse der Abgasanalyse und Abschätzung der Unsicherheiten der Abgasmessungen	77
4.2	Bestimmung des Verlaufes der Brennstoffmasse	81
4.2.1	Resultate der Online-Messung der Massenabnahme	81
4.2.2	Resultate der Offline-Messung der Massenabnahme	85
4.3	Auswertung der Temperaturmessungen	90
4.4	Ergebnisse der Bilanzierung der Stoff- und Energieströme für die Messungen	92
4.5	Ergebnisse der Verbrennungsrechnungen	94
4.6	Resultate der Validierung und Vergleich mit Messwerten	96
4.7	Ergebnisse und Diskussion der Modelleinflüsse auf die numerischen Simulationen zur Validierung	109
4.7.1	Diskussion des Lösungsverhaltens	109
4.7.2	Ergebnisse der Gitteranalyse	111
4.7.3	Ergebnisse der Simulationen mit Turbulenzmodell und veränderter turbulenter Prandtl- und Schmidt-Zahl	112
4.7.4	Ergebnisse bei verändertem Reaktionsmechanismus	116
4.8	Ergebnisse der Parameterstudie	116
4.8.1	Ergebnisse der numerischen Simulationen zur Optimierung der Geometrie	116

4.8.2	Ergebnisse der zusätzlichen numerischen Simulationen zur Untersuchung von Detailfragen	125
5	Zusammenfassung und Ausblick	127
	Literaturverzeichnis	131
A	Gleichungen für Verbrennungsrechnungen	141
A.1	Stöchiometrischer Luftbedarf und maximaler Kohlendioxidanteil	141
A.2	Umrechnung auf Bezugszustand	142
A.3	Bestimmung des Luftverhältnisses aus Messdaten	145
A.4	Luftmassenstrom	147
A.5	Abgasmassenstrom	148
A.6	Abgaszusammensetzung	150
A.7	Stoffdatenfunktionen für Verbrennungsrechnungen	151
A.8	Wirkungsgrad	151
B	Daten für numerische Simulationen	153
B.1	Thermodynamische Stoffdaten	153
B.2	Transportgrößen	154

Symbolverzeichnis

Formelzeichen

Symbol	Bedeutung	Einheit
A	Fläche	m^2
A	präexponentieller Faktor in Arrhenius-Gleichung	**
a	Wichtungsfaktor für WSGG-Spektralmodell	-
b	Koeffizienten für Wichtungsfaktoren im WSGG-Modell	T^{-1}
C	Konzentration	kmol/m^3
c_p	spezifische isobare Wärmekapazität	$\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
c_0	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	299792458 m/s
D	(kinematischer) Diffusionskoeffizient	m^2/s
d	Durchmesser	m
e	spezifische Energie	J/kg
E	Energie	J
g	Erdbeschleunigung	$9,81 \text{ m/s}^2$
H	Enthalpie	J
H_i	spezifischer (massebezogener) Heizwert	MJ/kg
h	spezifische Enthalpie	J/kg
i	Strahlungsintensität, Strahlungsenergiestromdichte	$\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{sr})$
i_λ	spektrale Strahlungsintensität	$\text{W}/(\text{m}^3 \cdot \text{sr})$
i_b	Strahlungsintensität (bzw. Strahlungsenergiestromdichte) des schwarzen Strahlers	$\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{sr})$
$i_{b,\lambda}$	spektrale Strahlungsintensität des schwarzen Strahlers	$\text{W}/(\text{m}^3 \cdot \text{sr})$
K	thermodynamische Gleichgewichtskonstante	-
K_C	Gleichgewichtskonstante in Konzentrationseinheiten	$(\text{kmol}/\text{m}^3)^{\sum \nu_i}$
k	spezifische kinetische Turbulenzenergie	m^2/s^2
k	spezifische Permeabilität	$1/\text{m}$
k	Variable für spektralen Absorptionskoeffizienten	$1/\text{m}$
k_κ	WSGGM-Koeffizient für Absorptionskoeffizient	$1/(\text{atm} \cdot \text{m})$
k_f	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante der Vorwärtsreaktion	**
k_b	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante der Rückwärtsreaktion	**
L	Länge	m^2
Le	Lewis-Zahl	-
M	molare Masse	kg/kmol
m	Masse	kg
N_A	Avogadro-Konstante	$6,022142 \cdot 10^{23} 1/\text{mol}$
n	Stoffmenge	kmol
\underline{n}	Normalvektor	-
n	Brechungsindex	-

Symbol	Bedeutung	Einheit
O	Reaktionsordnung	-
p	Druck	Pa
p_{HC}	Partialdruck unverbrannter Kohlenwasserstoffe (WSGGM)	Pa
Pr	Prandtl-Zahl	-
Q	Wärme	W
q^R	flächenbezogener Strahlungswärmestrom	W/m ²
R	spezifische Gaskonstante	J/(kg · K)
\bar{R}	universelle Gaskonstante	8,3144621 J/(mol · K)
Re	Reynolds-Zahl	-
S	volumenbezogener (Quell)term in Transportgleichung	*/m ³
S	Betrag der Schergeschwindigkeit	1/s
Sc	Schmidt-Zahl	-
s	Weg	m
\underline{s}	Richtungsvektor	m
t	Zeit	s
T	Temperatur	K
u	spezifische innere Energie	J/kg
V	Volumen	m ³
\bar{v}	molares Volumen	m ³ /kmol
v	Geschwindigkeit	m/s
X	spezifische Konzentration	kmol/kg
Δh_f^0	Bildungsenthalpie bei Standardbedingungen	kJ/kg
$\Delta \bar{h}_f^0$	molare Bildungsenthalpie bei Standardbedingungen	kJ/kmol
$\Delta_R g$	freie Enthalpie der Reaktion	J/kg
$\Delta_R \bar{g}$	molare freie Enthalpie der Reaktion	J/kmol

* steht für die Einheit der jeweiligen absoluten Erhaltungsgröße (z. B. „J“, „kg“ oder „kg·m/s“)

** abhängig von Reaktion mit kmol, m, s als Basiseinheiten

*** wenn nicht anders angegeben, dann dimensionslos

Griechische Symbole

Symbol	Bedeutung	Einheit
α	Absorptionsgrad	-
α	Wärmeübergangskoeffizient	W/(m ² · K)
β^*	Verlustkoeffizient	1/m
δ	Kronecker-Delta	-
Δ	Differenz	-
ϵ	Emissionsgrad	-
ϵ	Turbulenzdissipationsrate	m ² /s ³

Symbol	Bedeutung	Einheit
η	Wellenzahl	1/m
ϑ	Temperatur	° C
$\kappa_{a,\lambda}$	spektraler Absorptionskoeffizient	1/m
$\kappa_{p\eta}$	druckbezogener, spektraler Absorptionskoeffizient	1/(m · bar)
$\kappa_{s,\lambda}$	spektraler Streukoeffizient	1/m
λ	Wärmeleitfähigkeit	W/(m · K)
λ	Wellenlänge	m
λ_L	Luftverhältnis	
μ	dynamische Viskosität	kg/(m · s), Pa · s
ν	kinematische Viskosität	m ² /s
ν	stöchiometrischer Koeffizient	-
ξ	Massenanteil	kg/kg oder %***
ϱ	Dichte	kg/m ³
τ	viskose Spannung	Pa
τ	Transmissionsgrad	-
τ_{ij}	viskose Spannung entlang der ij-Ebene	Pa
ω	spezifische Turbulenzfrequenz	1/s
ζ	Volumenviskosität	kg/(m · s)
Φ	Phasenfunktion für Streuung	W/m ³
ψ	Stoffmengenanteil, Volumenanteil	kmol/kmol oder %***
Ω	Raumwinkel	sr

Indizes

Symbol	Bedeutung
au	außen
b	schwarzer Strahler
C	Kohlenstoff
EDM	Eddy Dissipation Model
EDCM	Eddy Dissipation Concept Model
eff	effektiv, wirksam
H	elementarer Wasserstoff
i,j,k	Laufvariable, beliebiger Index
konv	konvektiv
krit	kritisch
M	Mischung
m	gemittelt
max	maximal
min	minimal
nach	nach Reaktion
N	elementarer Stickstoff

Symbol	Bedeutung
NS	Navier-Stokes
O	elementarer Sauerstoff
R	Ruß
Rb	Rußbildner-Radikale
S	elementarer Schwefel
tan	tangential
tot	total bzw. Gesamt-
turb	turbulent
U	Umgebung
vor	vor Reaktion
λ	spektral
+	Standard
'	in Streurichtung
-	Vektor
=	Tensor

Hochgestellte Indizes

Symbol	Bedeutung
\cdot	Strom bzw. zeitbezogen
-	zeitlich gemittelte Größe
\wedge	flächenbezogen
\sim	turbulente Schwankungsgröße
+	Referenzwert
*	normiert
0	im Standardzustand

Abkürzungsverzeichnis

CFD	Computational Fluid Dynamics
DIN	Deutsches Institut für Normung
DNS	Direkte Numerische Simulation
EDM	Eddy Dissipation Model
EDCM	Eddy Dissipation Concept Model
EWBM	Exponential Wide Band Model
i.N.	im Normzustand (nach DIN 1343)
ppm	parts per million
ppi	pores per inch
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
RTD	Residence Time Distribution
WSGG	Weighted-Sum-of-Gray-Gases
WSGGM	Weighted-Sum-of-Gray-Gases-Model
WÜ	Wärmeübergang

Abbildungsverzeichnis

1.1	Aufbau und Funktionsweise eines Kaminofens	1
1.2	Spektraler Absorptionskoeffizient von Kohlendioxid in Stickstoff bei 296 K und 100 kPa	19
1.3	Spektraler Absorptionskoeffizient von Kohlendioxid in Stickstoff bei verschiedenen Temperaturen und Drücken	20
1.4	Absorptionsspektrum von Kohlendioxid nach Durchgang durch eine Gasschicht	21
2.1	Aufbau der beiden untersuchten Kaminöfen	29
2.2	Temperaturmessstellen an Außenoberflächen des Kaminofens „K 1“	32
2.3	Temperaturmessstellen an Außenoberflächen des Kaminofens „K 2“	33
2.4	Feuerraum- und Filtertemperaturmessstellen des Kaminofens „K 1“	33
2.5	Darstellung der Holzentnahme	35
3.1	Skizze zur einfachen Verbrennungsrechnung	37
3.2	Ablaufplan der einfachen Verbrennungsrechnung	39
3.3	Zeitlicher Verlauf des Massenanteils Kohlenmonoxid für verschiedene Reaktionsmechanismen	43
3.4	Zeitlicher Verlauf des Massenanteils Kohlendioxid für verschiedene Reaktionsmechanismen	44
3.5	Zeitlicher Verlauf der Massenanteile Propan und Wasserstoff	44
3.6	Zeitlicher Verlauf der Massenanteile Methan und Ethan	45
3.7	Örtlicher Verlauf des Massenanteils Kohlenmonoxid für verschiedene Reaktionsmechanismen	46
3.8	Örtlicher Verlauf des Massenanteils Kohlendioxid für verschiedene Reaktionsmechanismen	46
3.9	Örtlicher Verlauf der Massenanteil Propan und Wasserstoff	47
3.10	Örtlicher Verlauf der Massenanteile Methan und Ethan	47
3.11	Geometrischer Aufbau der numerischen Simulation zur Ermittlung des äußeren Wärmeübergangskoeffizienten	48
3.12	Lokale Verteilung des Wärmeübergangskoeffizienten auf der idealisierten Kaminofenoberfläche	49
3.13	Lokale Temperaturverteilung auf einer Schnittebene	49
3.14	Interpretation des Wichtungsfaktors in Form der spektralen Energieverteilung	60
3.15	Vergleich der Absorptions- und Emissionsgrade in Abhängigkeit der Temperatur für ein kohlendioxidreiches Gasegemisch	62
3.16	Vergleich der Absorptions- und Emissionsgrade in Abhängigkeit der Weglänge für ein kohlendioxidreiches Gasegemisch	62
3.17	Vergleich der Absorptions- und Emissionsgrade in Abhängigkeit der Temperatur für ein kohlenmonoxidreiches Gasegemisch	63
3.18	Vergleich der Absorptions- und Emissionsgrade in Abhängigkeit der Weglänge für ein kohlenmonoxidreiches Gasegemisch	63
3.19	Geometrie der numerischen Simulation des Kaminofens „K 1“	65

3.20	Geometrie der numerischen Simulation des Kaminofens „K 2“	65
3.21	Gitter der numerischen Simulation des Kaminofens „K 1“	66
3.22	Gitter der numerischen Simulation des Kaminofens „K 2“	67
3.23	Detailansicht der Luftzufuhr beim Kaminofen „K 1“	68
3.24	Detailansicht der Luftzufuhr beim Kaminofen „K 2“	69
3.25	Aufbau der parametrischen Geometrie	73
3.26	Variation des Filterwinkels bei konstanter Filterfläche	73
3.27	Variation des Filterwinkels bei variabler Filterfläche, gleichbedeutend mit Variation der Filterfläche	73
3.28	Variation der Sekundärluftöffnungsbreite	74
3.29	Position der Umlenplatte und Löcher	75
4.1	Vergleich der gemessenen Volumenanteile Kohlenmonoxid	77
4.2	Vergleich der gemessenen Volumenanteile Sauerstoff	78
4.3	Vergleich der gemessenen Volumenanteile Kohlendioxid	78
4.4	Vergleich der gemessenen Volumenanteile Kohlendioxid und Wasser	79
4.5	Mittlerer zeitlicher Verlauf und zeitliche Standardabweichungen für eine Messung	80
4.6	Zeitlicher Verlauf der gesamten Brennstoffmasse	81
4.7	Abnahme der Brennstoffmasse bei verschiedenen Abbrandperioden	82
4.8	Erklärende Darstellung zur gesuchten Modellfunktion der Massenabnahme	83
4.9	Messwerte und ermittelte Modellfunktion der Massenabnahme	84
4.10	Modellfunktionen der mittleren, minimalen und maximalen Massenabnahme	85
4.11	Vergleich der Offline-Messung mit den ermittelten Modellfunktionen	85
4.12	Zusammensetzung des Holzscheites zu verschiedenen Zeiten	86
4.13	Vergleich der gemessenen und aus Messdaten bestimmten mittleren Abgaszusammensetzung	87
4.14	Vergleich der gemessenen und durch Fehlerminimierung aus Messdaten berechneten mittleren Abgaszusammensetzung	87
4.15	Zeitlicher Verlauf des Luftverhältnisses	89
4.16	Vergleich der gemessenen und berechneten mittleren Abgas- und Elementarzusammensetzung bei Anpassung durch Fehlerminimierung	90
4.17	Verteilung der absoluten Geschwindigkeit auf der Längsebene	97
4.18	Verteilung der absoluten Geschwindigkeit auf der Frontalebene	97
4.19	Temperaturverteilung auf der Längsebene	98
4.20	Temperaturverteilung auf der Frontalebene	99
4.21	Temperaturverteilung auf den Außenoberflächen	100
4.22	Verteilung des Massenanteils Kohlendioxid auf der Längsebene	102
4.23	Verteilung des Massenanteils Kohlendioxid auf der Frontalebene	102
4.24	Verteilung des Massenanteils Kohlenmonoxid auf der Längsebene	103
4.25	Verteilung des Massenanteils Kohlenmonoxid auf der Frontalebene	104
4.26	Verteilung der Verweilzeit auf der Längsebene	105
4.27	Verteilung der Verweilzeit auf der Frontalebene	105
4.28	Verteilung des Massenanteils Ruß auf der Längsebene	106
4.29	Verteilung des Massenanteils Ruß auf der Frontalebene	107
4.30	Verteilung der Konzentration der Rußbildnerradikale auf der Längsebene	108

4.31	Verteilung der Konzentration der Rußbildnerradikale auf der Frontalebene . .	108
4.32	Verlauf von Konvergenz und Bilanzfehler der Simulation des Kaminofens „K 1“	110
4.33	Unterschied des Massenanteils Kohlenmonoxid zwischen mittlerer und höchster Auflösung	112
4.34	Verteilung des konvektiven Wandwärmestromes ohne und mit Turbulenzmodell	113
4.35	Verteilung des Wandwärmestromes aufgrund von thermischer Strahlung ohne und mit Turbulenzmodell	114
4.36	Verteilung des Kohlenmonoxidanteils ohne und mit Turbulenzmodell auf der Längsebene	115
4.37	Verteilung der dynamischen Viskosität ohne und mit Turbulenzmodell auf der Längsebene	115
4.38	Heizleistung in Abhängigkeit der gewählten Parameter	119
4.39	Kohlenmonoxidkonzentration in Abhängigkeit der gewählten Parameter . . .	120
4.40	Rußkonzentration in Abhängigkeit der gewählten Parameter	121
4.41	Luftmassenstrom in Abhängigkeit der gewählten Parameter	122
4.42	Sekundärluftmassenstrom in Abhängigkeit der gewählten Parameter	123
4.43	Einflüsse der geometrischen Parameter auf Zielgrößen	124
4.44	Verteilung des Massenanteils Kohlenmonoxid auf Schnittebene	125
4.45	Verteilung der Geschwindigkeitsvektoren im Falle von Löchern	126
A.1	Veranschaulichung der Zusammenhänge bei Luftüberschuss im Abgas	144

Tabellenverzeichnis

1.1	Zusammenfassung der CFD-Simulationen der Verbrennung fester Brennstoffe	26
2.1	Charakterisierung der Messungen	30
2.2	Heizwerte und Elementarzusammensetzungen des verwendeten Holzes bei verschiedenen Messungen	31
2.3	Verwendete Messsysteme für die Gasanalyse	31
3.1	Elementare Zusammensetzung des verwendeten Holzes	42
3.2	Berechnete Massenanteile Kohlenstoff zu zwei verschiedenen Zeitpunkten	44
3.3	Koeffizienten der Wichtungsfaktoren und Absorptionskoeffizienten für das WSGG-Modell	61
3.4	Variationen des Standardfalles	74
4.1	Mittlere Abgaszusammensetzung sowie Luftverhältnisse für die Messungen	81
4.2	Koeffizienten für die Modellfunktion der Massenabnahme nach Gleichung (4.1)	84
4.3	Summenformel für umgewandelten Brennstoff und verbliebenen Restbrennstoff	88
4.4	Koeffizienten für die Modellfunktionen der Massenanteile	89
4.5	Mittlere Temperaturen der Außenoberflächen und deren Standardabweichung in der oberen Ebene für die Messungen	91
4.6	Mittlere Temperaturen der Außenoberflächen und deren Standardabweichung in der mittleren Ebene für die Messungen	91
4.7	Mittlere Temperaturen der Außenoberflächen und deren Standardabweichung in der unteren Ebene für die Messungen	91
4.8	Mittlere Temperaturen und deren Standardabweichung für die Messungen	92
4.9	Mittlere energetische und stoffliche Kennwerte für die Messungen	93
4.10	Aus Temperaturen der Außenoberflächen berechnete Heizleistungen im Vergleich zu ermittelten Heizleistungen gemäß vereinfachter Verbrennungsrechnung	94
4.11	Eingabedaten für vereinfachte Verbrennungsrechnung	95
4.12	Ergebnisse der einfachen Verbrennungsrechnung	96
4.13	Mittlere Temperaturen und deren Standardabweichung für die simulierten Fälle	98
4.14	Mittlere energetische Parameter für die simulierten Fälle und Vergleich mit Messwerten	100
4.15	Mittlere Abgaszusammensetzung am Abgasstutzen der simulierten Fälle	101
4.16	Mittlere Abgaszusammensetzung am Abgasstutzen der simulierten Fälle	101
4.17	Mittlere Verweilzeit in den Kaminöfen	104
4.18	Massenanteil Ruß am Abgasstutzen	106
4.19	Eigenschaften und Ergebnisse der Gitteranalyse für Kaminöfen „K 1“	111
4.20	Eigenschaften und Ergebnisse bei Veränderung des Turbulenzmodells	112
B.1	Verwendete Polynomkoeffizienten zur Bestimmung der Wärmekapazität, Enthalpie und Entropie	153

B.2	Verwendete kritische Daten zur Bestimmung der Viskosität und Wärmeleitfähigkeit	154
-----	----------------------------------------------------------------------------------------------	-----

1 Einführung und Stand des Wissens

1.1 Begriffe und Motivation zur Untersuchung von Kaminöfen

Der Begriff „Kaminöfen“ ist nicht exakt definiert und wird in der Literatur sowohl für Öfen als auch für Kamineinsätze gebraucht. Nach Schrader (2001) ist der Name im 19. Jahrhundert entstanden und wurde für neuartige Öfen verwendet, die in offene Kamine¹ zur Effizienzverbesserung gestellt wurden. Als Neuerung verfügten sie über eine Sichtscheibe und kombinierten somit die Vorzüge eines Kamines (sichtbares Feuer) mit der Effizienz von Zimmeröfen. In späterer Zeit und der Neuzeit wurden sie umkonstruiert und konnten dann wie andere Öfen frei im Raum aufgestellt werden. Bis heute werden aber auch Kamineinsätze als Kaminöfen bezeichnet. Von geschlossenen Kaminen grenzen sie sich dadurch ab, dass sie als industrielles Fertigprodukt geliefert werden und (relativ leicht) versetzt werden können. Kamine sind im Gegensatz dazu vor Ort (oft aus vorgefertigten Teilen) handwerklich errichtete, meist direkt in die Gebäudestruktur integrierte und später nicht versetzbare Einzelfeuerstätten.

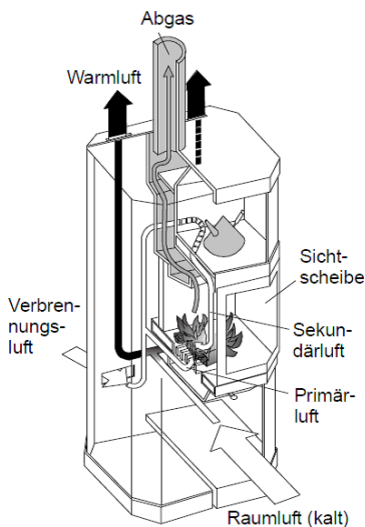


Abbildung 1.1: Aufbau und Funktionsweise eines Kaminofens (entnommen aus Kaltschmitt et al. (2009))

Moderne Kaminöfen wurden laut Schrader (2001) in der Mitte des 20. Jahrhunderts entwickelt und kommen heute oft als Erweiterung vorhandener Heiztechnik mit hoher Behaglichkeit bei einer Heizleistung von 6-20 kW vor, wobei das Sichtfenster in der Tür integriert ist.

Im Gegensatz zu Pelletöfen erfolgt die Beschickung manuell, was zu einem zeitlich veränderlichen Betriebsverhalten führt und Fluktuationen hervorruft. Die Luftzufuhr erfolgt durch Primärluft, welche durch den Rost von unten in den Feuerraum eintritt und durch Sekundärluft, die dem Feuerraum von der Seite zugeführt wird. Nach Kaltschmitt et al. (2009) wird zusätzlich eine Scheibenspülluft eingebracht, um die Scheibe rußfrei zu halten. In Abbildung 1.1 sind der Aufbau und die Funktionsweise exemplarisch skizziert.

Entsprechend der DIN EN 13240 werden Kaminöfen als Raumheizer für feste Brennstoffe und in dieser Kategorie als Einzelfeuerstätten mit geschlossenen Feuerraumtüren charakterisiert.

Wie aus Bäfver et al. (2011) hervorgeht, wird in modernen Kaminöfen die Luftzufuhr durch den

¹Als Kamine werden Feuerstätten bezeichnet, die aus einem Feuerraum (offen oder geschlossen) und einer Abgasanlage bestehen. Die Abgasanlage selbst wird oft auch Esse, Schornstein und manchmal doppeldeutig Kamin genannt.

Rost deutlich verringert und stattdessen die Scheibenspülluft als Primärluft genutzt. Diese Darstellung entspricht den im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Kaminöfen, bei denen die primäre Verbrennungsluft am oberen Rand der Scheibe zugeführt und auf Luft durch den Rost weitgehend verzichtet wird.

Die beschriebene Problematik der Begrifflichkeiten erschwert die Literaturrecherche erheblich, da in der englischen Sprache Kaminöfen sehr unterschiedlich bezeichnet werden. Verwendung finden „stove“, „fireplace“, „firesite“, „chimney“, die ebenso in Kombination mit „domestic“ und „wood-burning“ zu finden sind.

Biogene Brennstoffe können fossile Energieträger substituieren, führen aber in Einzelfeuerstätten oft zu einer ineffizienten Energieumwandlung. Steigende Energiekosten und der damit verbundene Drang zur Kosteneinsparung sind aber nur schwer steuerbar und führen zur Zeit zu einem verstärkten Einsatz von Kaminöfen - ohne Berücksichtigung der Effizienz. Zusätzlich stehen die Ofenbauer in einem wirtschaftlichem Wettbewerb, so dass Kaminöfen oft sehr preiswert gebaut und unter Umständen vermehrt umweltschädliche Abgase (zum Beispiel Staub und Kohlenmonoxid) emittieren.

Der Gesetzgeber reagiert auf diese Entwicklung mit der Forderung von niedrigeren Grenzwerten, die aber nur durch eine stetige Verbesserung von Kaminöfen und einem besseren Verständnis der darin ablaufenden physikalischen Vorgänge erreicht werden können. Aus dem vorliegenden Literaturmaterial kann geschlossen werden, dass nur wenige wissenschaftliche Untersuchungen zur Strömungsmodellierung und Gesamtbilanzierung von holzbetriebenen Kaminöfen existieren. Diese grundlegenden Untersuchungen sind nach Meinung des Autors notwendig, um eine kontinuierliche Verbesserung von Kaminöfen hinsichtlich einer Wirkungsgraderhöhung und Verminderung von Emissionen zu erreichen. Motivation dieser Arbeit ist daher, einen Beitrag zur numerischen Modellierung und experimentellen Untersuchung von Kaminöfen zu liefern.

1.2 Stand der experimentellen Untersuchungen von Kaminöfen

Kaminöfen sind schon seit Jahren im Einsatz, trotzdem sind experimentelle Untersuchungen zum Betriebsverhalten, Abbrandgeschwindigkeit und der stofflichen und energetischen Bilanzierung schwer zu finden. Es kann angenommen werden, dass die Entwicklung im Wesentlichen von Herstellern vorangetrieben wurde und im wissenschaftlichen Bereich wenig Interesse fand. Mit Aufkommen eines erhöhten Umwelt- und Gesundheitsbewusstseins in den 70er Jahren des vergangenen Jahrhunderts wurden wissenschaftliche Untersuchungen zu einzelnen Aspekten der Schadstoffbildung durchgeführt. Vorrangig ging es dabei um die Emission von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen, Formaldehyd und Benzen. In den letzten Jahren wurden zunehmend Feinstaubemissionen und Katalysatoren zur Reduktion von Kohlenmonoxid und flüchtiger Kohlenstoffverbindungen untersucht.

In Koyuncu u. Pinar (2007) werden der zeitliche Verlauf (in 5-Minuten-Intervallen) der Abgaszusammensetzung (Kohlenmonoxid, Stickoxide, Schwefeldioxid und Ruß) und der Wirkungsgrad eines Kaminofens mit unterschiedlichen Brennstoffen (Kohle, Feuerholz, Holzspäne,

Erdnuss-, Haselnuss-, Walnussschalen, Samenschalen von Aprikosen, Maiskolben ohne Körner, Weizenhalmreste, Maishülsen, Maishalmreste) untersucht. Die Temperaturen an den Außenoberflächen werden an mehreren Punkten mittels eines Infrarotthermometers aufgenommen. Eine stoffliche Bilanzierung der Elemente mit Angabe der Luftverhältnisse und der Massenströme ist nicht dargestellt worden. Die Energie wird durch die Berechnung der durch Strahlung und Konvektion an den Raum abgegebenen Wärme bilanziert.

In der Arbeit von Bäfver et al. (2011) ist der Hauptaspekt die Ermittlung der Feinstaubemission in Abhängigkeit von der Zeit für vier unterschiedliche, holzbetriebene Feuerstätten (zwei Kaminöfen, einen Pelletofen und einen Herd). Die Emissionen von Kohlendioxid und Kohlenmonoxid werden ebenfalls angegeben. Eine zeitlich aufgelöste, stoffliche und energetische Gesamtbilanzierung für holzscheitbetriebene Kaminöfen mit Untersuchungen zur Abbrandgeschwindigkeit ist offenbar nicht vorhanden. Die während der Prüfverfahren aufgenommenen Rohdaten werden nicht veröffentlicht, sondern nur die daraus berechneten, mittleren Prüfkennziffern. Eventuell werden die Rohdaten von den Prüfeinrichtungen an den jeweiligen Hersteller des Kaminofens übermittelt, aber nicht wissenschaftlich ausgewertet und veröffentlicht.

Neben den experimentellen Untersuchungen von Kaminöfen existiert eine Reihe von Veröffentlichungen, die sich peripher mit der Verbrennung von Holz beschäftigen und den Abbrand eines einzelnen Scheites experimentell in speziellen Brennkammern untersuchen. Porteiro et al. (2006) erwähnt eine Apparatur, in der Holzscheite mit 25 mm Durchmesser und 300 mm Länge verbrannt und die Abgaszusammensetzung über der Zeit analysiert werden kann, und führt diese Experimente mit verschiedenen Hölzern durch, um ein mathematisches Abbrandmodell zu entwickeln.

1.3 Stand der numerischen Simulation von Kaminöfen

Neben der rein praktischen und empirischen Vorgehensweise zum Bau und zur Auslegung von Kaminöfen werden schon seit Beginn des 20. Jahrhunderts Berechnungen durchgeführt, welche es erlauben, die Heizleistung und die Abgasmassenströme abzuschätzen. Diese vereinfachten Verbrennungsrechnungen lassen die geometrischen Verhältnisse weitgehend unberücksichtigt, beschreiben den Feuerraum durch an einem Punkt konzentrierte Variablen (Druck, Temperatur, stoffliche Zusammensetzung) und unterliegen gewissen Annahmen über den zugeführten Luftmassenstrom, der Art der Verbrennung (vollständig oder unvollständig) und der Abgastemperatur. Sie stellen bis heute die Grundlage für die Dimensionierung und Auslegung von marktüblichen Kaminöfen dar. In Abschnitt 3.1.1 wird eine vereinfachte Verbrennungsrechnung vorgestellt und als Voruntersuchung und Validierungsmöglichkeit eingeführt.

Die numerische Simulation von Kaminöfen für die Auslegung wird von Herstellern selten und nur im Rahmen von gemeinsamen Forschungsprojekten mit wissenschaftlichen Einrichtungen durchgeführt. Sie hat dabei eher begleitenden Charakter bei Detailuntersuchungen und Optimierungsfragen. Darüber hinaus weisen Kaminöfen einige Besonderheiten auf, die eine Modellierung im Gegensatz zu anderen Raumheizern (zum Beispiel Pellet- oder Grundöfen) erschweren. So sollen Kaminöfen zum Beispiel ein zeitlich variierendes, fluktuierendes Flammenbild erzeugen und so den Abbrand der Holzscheite in einer Abbrandperiode sichtbar machen. Die

diskontinuierliche Betriebsweise, bei der nacheinander Holzscheite manuell aufgelegt werden, ist beabsichtigt und führt zu einem instationären Betriebsverhalten. Eine numerische Simulation des gesamten Kaminofens inklusive des zeitlichen Verhaltens ist dadurch aufwändig und wird nur selten durchgeführt.

Es existieren daher wenige Veröffentlichungen zu diesem Thema. Menghini et al. (2007) und Menghini et al. (2008) modellieren einen Kaminofen mit einer Brennstoffleistung von 18 kW und mit angeschlossenem Abgas-Wasser-Wärmeübertrager mittels der kommerziellen Software CFD-ACE+ der Firma ESI-CFD. Die Berechnung erfolgt für den stationären Fall unter mittleren Abbrandbedingungen für eine Gitterauflösung von 100.000 Zellen. Als Turbulenzmodell kommt das k- ϵ -Modell zum Einsatz und die Strahlung wird mittels des „*Discrete Ordinate*“-Modells berechnet. Die Verbrennung wird komplett vernachlässigt und nur die thermische Energie der Verbrennung berücksichtigt.

In der Arbeit von Tabet et al. (2010) wird ein Kaminofen mit k- ϵ -Turbulenzmodell und dem „*Discrete Ordinate*“-Strahlungsmodell mit ca. 600.000 Zellen simuliert. Die Gasphasenreaktionen und die heterogene Oberflächenreaktion von Kohlenstoff mit der Gasphase erfolgten direkt im Strömungslöser „CFD_Saturne“ und der Holzsplit wird durch ein selbst entwickeltes, eindimensionales Bettmodell beschrieben.

In Scharler et al. (2011) werden Simulationen von Kaminöfen erwähnt, deren Abbrandmodell auf einem modifizierten Modell für Rostfeuerungen basiert, welches durch Umrechnung des Wegprofils entlang des Rostes in ein Zeitprofil angepasst wurde. Die Turbulenz wird mit dem realizable-k- ϵ -Modell berechnet und als Strahlungsmodell kommt ebenfalls das „*Discrete Ordinate*“-Strahlungsmodell zum Einsatz.

Neben der konkreten Betrachtung von Verbrennungsvorgängen in Kaminöfen existiert eine große Anzahl von Veröffentlichungen zum Thema Verbrennung von biogenen Festbrennstoffen und deren mathematische Beschreibung beziehungsweise numerische Simulation (beispielsweise Saastamoinen u. Richard (1996), Saastamoinen (2003), Baillifard et al. (2008) oder Scharler u. Obernberger (2000)). Je nach Anwendungsfall stehen dabei unterschiedliche Aspekte im Vordergrund. So ist für kraftwerkstechnische Simulationen die Minimierung schädlicher Gase wie NO_x und CO von größerem Interesse als die Beschreibung der Rußentstehung oder aber des äußeren Wärmeüberganges. In den nachfolgenden Abschnitten sollen deshalb die verschiedenen Vorgehensweisen und Ansätze erläutert werden, ohne die Modelle konkret zu beschreiben. Der Fokus wurde dabei auf eine (mögliche) numerische Simulation mit Programmen zur dreidimensionalen Strömungsberechnung gelegt, das heißt, Betrachtungen basierend auf Bilanzmodellen mit örtlich konzentrierten Bilanzgrößen bleiben unberücksichtigt.

1.4 Stand der CFD-Modellierung von Verbrennungsvorgängen fester Brennstoffe

1.4.1 Allgemeines

In diesem Abschnitt werden die bei der numerischen Simulation der Verbrennung von festen Brennstoffen auftretenden Detailmodelle vorgestellt, um eine Einordnung der Arbeit vornehmen zu können. Die Turbulenzmodelle und die Modellierung des Energietransportes werden im Kapitel „Mathematische Modellierung“ detailliert beschrieben, da sie auch unabhängig von Verbrennungsmodellen verwendet werden. Die Modelle für die thermische Strahlung von Gasen sowie der Turbulenzeinfluss auf die Verbrennung hingegen sollen hier kurz erläutert werden, da sie direkt mit Verbrennungssimulationen gekoppelt sind.

Als Verbrennungen werden chemische Reaktionen bezeichnet, bei der ein (Brenn)stoff beziehungsweise Energierohstoff unter Freisetzung thermischer Energie oxidiert wird. Im Gegensatz zu reinen gasförmigen Brennstoffen (zum Beispiel Methan) wird die Verbrennung von festen Stoffen² in mehrere, ineinander übergreifende Teilschritte unterteilt:

- Trocknung
- Übergang von festen zu gasförmigen Stoffen (Pyrolyse und Vergasung)
- Reaktion fester Stoffe mit gasförmigen Stoffen (heterogene Reaktionen)
- Reaktion gasförmiger Stoffe (homogene Gasphasenreaktion)

Für eine genaue Beschreibung der einzelnen Vorgänge sei auf weiterführende Literatur (zum Beispiel Schneider (2003) oder Kaltschmitt et al. (2009)) verwiesen. Eine Modellierung der Verbrennung umfasst also eine Anzahl von Detailphänomenen, die auf unterschiedliche Art und Weise mathematisch durch Detailmodelle beschrieben werden. Mit dem Begriff „Verbrennung“ sind untrennbar weitere physikalische Phänomene verknüpft. So müssen bei jeder Verbrennungssimulation der Wärme- und Stofftransport charakterisiert, die Phase (gasförmig, flüssig, fest oder mehrphasig) beschrieben und der Turbulenzeinfluss definiert werden. Aus diesem Grund umfasst der Begriff „Verbrennungssimulation“ neben der eigentlichen Verbrennung oft eine Reihe ganz unterschiedlicher Einzelsimulationen und ist entsprechend schwer zu gruppieren. Die Reaktionskinetik selbst umfasst neben der Mikrokinetik, die den zeitlichen Verlauf der chemischen Reaktion umfasst, auch die Makrokinetik, bei der die Wärme- und Stofftransportprozesse berücksichtigt werden. Eine mögliche Gruppierung der verschiedenen Modellierungsansätze der Verbrennungssimulationen kann nach folgenden Fragen vorgenommen werden:

- Wie werden die Brennstoffe abgebildet (Phasen- und Transportmodell)?
- Wie werden die Mikrokinetik (reine Reaktionskinetik der chemischen Spezies) und Makrokinetik (Kinetik unter Berücksichtigung der Stoff- und/oder Energietransportprozesse) der Verbrennung beschrieben (Verbrennungskinetikmodell) ?

²Holz ist ein dreiphasiger Stoff, bestehend aus festen Holzfasern und gas- beziehungsweise flüssigkeitsgefüllten Zwischenräumen (hauptsächlich Wasser).

- Wie kann im Falle von Turbulenz der gemittelte chemische Quellterm berechnet werden (Mittelungsmethoden)?
- Wie wird thermische Strahlung berücksichtigt?

Diese Gruppierung erlaubt eine erste Einordnung der vorliegenden Literatur und ist im Detail erweiterbar. Nachfolgend werden die Möglichkeiten der einzelnen Modellierungsansätze kurz skizziert und exemplarisch Literaturquellen dazu angegeben.

In den letzten Jahren wurden vermehrt Anlagen und Konzepte wissenschaftlich untersucht, bei denen die Vergasung fester Energierohstoffe zum Zweck einer separaten Gasverbrennung das Ziel des Prozesses darstellt und möglichst viel energiereiches Produktgas (bestehend aus einem hohen Anteil von Kohlenmonoxid, Methan und Wasserstoff) produziert werden soll. Ziel dieser Prozesse ist die Nutzung des Produktgases zur Stromerzeugung in Gasbrennern oder Arbeitsmaschinen mit interner Verbrennung (Motoren, Gasturbinen, etc.). Im Rahmen dieser Untersuchungen wurde die Simulation der Vergasung fester Stoffe verbessert und die dabei gewonnenen Erkenntnisse können daher auch für die Simulation von Verbrennungen genutzt werden. Aus diesem Grund wurde die Literaturrecherche auf diese Thematik ausgeweitet.

1.4.2 Phasen- und Transportmodell

Zur Beschreibung der Transportvorgänge in den Phasen³ hat sich die Eulersche Methode des ruhenden Beobachters durchgesetzt und wird in allen gefundenen Quellen angewandt. In vielen Arbeiten unter Berücksichtigung komplexer Geometrie beziehungsweise des gesamten Verbrennungssystems wird die Festphase nicht im Detail modelliert, sondern über Randbedingungen in der Gasphase berücksichtigt. Eine Zwischenstufe auf dem Weg zur detaillierten Beschreibung der Vorgänge im Festkörper stellen die Verbrennungen von Schüttungen stückigen Brennstoffes dar. Für einige Verbrennungssimulationen können die Partikel als sehr klein und homogen angenommen und entsprechend modelliert werden. Die aufwändigste Form der Modellierung ist die Beschreibung der festen Phase als Körper mit den darin (und an den Phasengrenzen) auftretenden Transportvorgängen. Zusammengefasst lässt sich somit folgende Gruppierung vornehmen:

- Beschreibung der festen Phase durch Randbedingung
- Beschreibung der festen Phase als poröser Körper
- Modellierung der festen Phase als Partikel mit homogenem Zustand
- Modellierung der festen Phase als Festkörper

Bei den Simulationen mit **Beschreibung der festen Phase durch Randbedingung** wird der Festkörper komplett aus der Geometrie entfernt, so dass nur noch die Ränder übrig bleiben. An den Rändern werden die vom Feststoff in die Gasphase emittierten Stoffe als Randbedingungen angegeben. Diese Methode ist vergleichsweise einfach, allerdings muss ein Zusammenhang zwischen dem Massenstrom und der Zusammensetzung des emittierten Gases und dem Umgebungszustand bekannt sein, was häufig nicht der Fall ist. Aus diesem Grund wird oft eine

³Räumlicher Bereich, in dem der Aggregatzustand der Materie gleich ist

konstante, auf Messwerten und/oder Annahmen basierende Gaszusammensetzung definiert, wodurch indirekt von einem Sauerstoffüberschuss ausgegangen wird. Nur dann kann davon ausgegangen werden, dass sich auch das angenommene Gas bildet. Darüber hinaus wird dabei der Sauerstoffkonsum zur Bildung dieses Gases vernachlässigt, was die Stoffbilanzen beeinträchtigt. Die Simulationen in Menghini et al. (2007) und Menghini et al. (2008) sind Beispiele dafür. Für Rostfeuerungen existieren aber auch empirisch ermittelte, komplexe Modelle zur Bestimmung der Gaszusammensetzung in Abhängigkeit von der Weglänge auf dem Rost. Diese Modelle werden außerhalb der CFD-Simulation implementiert und in geeigneter Weise mit dem CFD-Programm gekoppelt. In Klasen u. Görner (1998) wird beispielsweise eine Müllverbrennungsanlage mit diesem Ansatz modelliert. Ebenso wurde er auch von Baillifard et al. (2008) zur CFD-Simulation eines Brenners für Holzgas im Labormaßstab und in Porteiro et al. (2009) für einen Holzpelletbrenner mit Warmwasserbereitung genutzt.

Bei den Modellierungsansätzen mit **Beschreibung der festen Phase als poröse Körper** wird der Brennstoff in seiner makroskopischen Form (Schüttung, Festbett, Ballen) geometrisch in der Simulation berücksichtigt und örtlich aufgelöst. Die einzelnen Brennstoffstücke (zum Beispiel Holzhackschnitzel oder Pellets) werden aber nicht örtlich aufgelöst. Der poröse Körper wird dann mit der Gasphase durch einen Quellterm gekoppelt. So untersuchte Wurzenberger et al. (2002) beispielsweise eine biomassebetriebene Rostfeuerungsanlage mit durchströmtem Bett. Wolf (2005) modellierte so die Abfallverbrennung auf einem Rostsystem und Schneider (2003) simulierte die Festbettvergasung von Holz nach diesem Ansatz. In Klason u. Bai (2007) und T. Klason et al. (2008) wird damit ein Holzpelletofen simuliert und Miltner et al. (2007) nutzte ihn, um die Verbrennung von Biomasseballen zu modellieren. Die Berechnung des Quellterms in Abhängigkeit von den Schüttungseigenschaften erfordert angepasste Ansätze, die oft durch Unterroutrinen implementiert werden, welche mit dem CFD-Programm in geeigneter Weise gekoppelt werden.

Die **Modellierung der festen Phase als Partikel mit homogenem Zustand** kommt bei Staubfeuerungen (zum Beispiel Kohle) und Wirbelschichtfeuerungen zum Einsatz. Dabei werden kleine Partikel (bis wenige Millimeter), die homogene Eigenschaften aufweisen, mittels der Lagrangeschen Methode des mitbewegten Beobachters beschrieben. In Álvarez et al. (2011) wird dieser Ansatz zur Simulation der Flugstaubverbrennung von Kohle genutzt.

In der **Modellierung der festen Phase als Festkörper mit örtlich variablem Zustand** werden der Feststoff örtlich und zeitlich aufgelöst und die darin ablaufenden Vorgänge des Wärme- und Stofftransportes sowie der chemischen Reaktionen detailliert beschrieben. Es kann als eine Erweiterung des Ansatzes der porösen Schüttung angesehen werden, da jeder feste Brennstoff als Haufwerk aus mehr oder weniger porösem Feststoff betrachtet werden kann. Die Ermittlung von mittleren, intrapartikulären Transportgrößen für den Wärme- und Stofftransport ist sehr aufwändig und erfordert an den konkreten Brennstoff angepasste Ansätze. Aus diesem Grund werden diese Simulationen meist an rotationssymmetrischen Kugelpartikeln mit nur einer Dimension durchgeführt. Eine ausgeprägte Anisotropie der Stoffeigenschaften (wie beispielsweise bei Holz) kann mit diesem Ansatz nicht berücksichtigt werden.

In Porteiro et al. (2006) wird dieser Ansatz für die Simulation des Abbrands eines einzelnen, zylindrischen Holzscheites genutzt und mit experimentellen Daten verglichen. In Horvat et al. (2009) wird die Zündung und der Abbrand von Holzproben beschrieben, wobei die selbe Methode

wie in Novozhilov et al. (1996) und Novozhilov (2001) zum Einsatz kommt. Yang et al. (2011) untersucht einen Feuerunfall in einem Lagerhaus mit diesem Ansatz. Yang et al. (2008), Lu et al. (2008) und Haseli et al. (2011) nutzen ebenfalls diesen Ansatz, um den Abbrand einzelner Holzstücke detailliert zu beschreiben. In Dasappa et al. (1998) und Galgano u. Di Blasi (2006) werden jeweils eindimensionale Modelle vorgestellt, um den Abbrand eines Holzstückes zu simulieren. In allen Veröffentlichungen mit diesen detaillierten Modellen, außer Yang et al. (2011), wird eine maximale Dimension der untersuchten Holzstücke von höchstens 20 mm angenommen.

Ein wichtiger Aspekt bei der Verbrennung fester Stoffe in Kaminöfen sind die diskontinuierliche Brennstoffzufuhr und die daraus resultierenden zeitlichen Schwankungen. Da die Holzscheite sich aufgrund ihrer Größe nicht mit der Lagrangeschen Betrachtungsweise modellieren lassen, muss entweder eine instationäre Berechnung durchgeführt oder quasi-stationäre Annahmen getroffen werden. Rostfeuerungen und Pelletöfen können sehr gut als quasi-stationär angesehen werden, da sich im realen Betrieb ein stationärer Zustand mit kontinuierlicher Brennstoffzugabe und Abbrand einstellt. Um bei Kaminöfen den Rechenaufwand zu verringern beziehungsweise die Simulation überhaupt erst zu ermöglichen, werden in diesem Fall bei den meisten Simulationen mittlere Werte angenommen. Die Ansätze zur Modellierung der festen Phase als Festkörper mit örtlich variablem Zustand schließt eine stationäre Betrachtung dagegen von vornherein aus, da ja gerade der zeitliche Abbrand Gegenstand der Modellierung ist.

Die Transportmodelle in der Gasphase lassen sich in zwei Arten unterteilen. Dem **Mischungsanteilansatz** (engl.: „*mixture fraction approach*“) und dem **Massenanteilansatz** (engl.: „*mass fraction approach*“). Beim Mischungsanteilansatz wird die Verbrennung als reines Mischungsproblem mit einer die Mischung beschreibenden Variablen dargestellt. In Analogie zu den Massenanteilen der chemischen Spezies werden Elementmassenanteile ξ_i als Verhältnisse der Masse des Elementes i zur Gesamtmasse definiert:

$$\xi_i = \sum_{j=1}^{\text{Speziesanzahl}} \xi_{i \text{ in } j} \cdot \xi_j \quad (1.1)$$

Der Mischungsanteil ergibt sich dann, unabhängig von der Wahl des Elementes i , nach:

$$f = \frac{\xi_i - \xi_{i, \text{Ox}}}{\xi_{i, \text{Fuel}} - \xi_{i, \text{Ox}}} \quad (1.2)$$

und ist für alle Elemente i gleich. „Fuel“ und „Ox“ beziehen sich auf den Brennstoff- beziehungsweise Oxidationsmitteleinlassstrom. Der Mischungsanteil ist demnach der Massenanteil aller im Brennstoffstrom vorkommenden Elemente (auch der Elemente, die im Oxidationsmittelstrom ebenfalls vorkommen, zum Beispiel O_2) am gesamten Massenzustrom. Der Vorteil dieser Methode ist, dass nur eine einzige Erhaltungsgleichung für den Mischungsanteil aufgestellt und gelöst werden muss und die Gaszusammensetzung und die Temperatur in Abhängigkeit davon bestimmt werden kann. Nachteilig ist, dass der Zusammenhang zwischen Mischungsanteil und Temperatur beziehungsweise Gaszusammensetzung nur für einfache Bruttoreaktionen als explizite Gleichung angebar ist. Für komplexe Reaktionsmechanismen müssen Bibliotheken unter Berücksichtigung von Turbulenzparametern erstellt werden, was aufwändig ist und

spezielle Computerprogramme voraussetzt. Darüber hinaus ist die Energieerhaltungsgleichung bei diesem Ansatz mit der Massenerhaltung der chemischen Spezies gekoppelt und dadurch die Temperatur überbestimmt (einmal durch den Mischungsanteil, zweitens durch Wärme- und Stofftransport), was weitere Annahmen und Modelle (zum Beispiel Flamelet-Modelle) erfordert. In Yang et al. (2011) wird dieser Ansatz verwendet.

Im **Massenanteilansatz** hingegen wird für jede chemische Spezies eine Transportgleichung gelöst. Dies erhöht zwar den Rechenaufwand, unterliegt aber keinerlei Einschränkungen. Aufgrund dieser Flexibilität wird bei fast allen Arbeiten zur Verbrennung fester Stoffe dieser Ansatz gewählt.

1.4.3 Reaktionsmechanismen und Reaktionskinetik

1.4.3.1 Einführung

Reaktionsmechanismen sind eine Folge von ablaufenden Reaktionen, für die Geschwindigkeitsansätze in Form der Reaktionskinetik formuliert werden müssen. Bei der Umsetzung fester Brennstoffe wird meist zwischen Feststoffreaktionen, homogenen Gasphasenreaktionen und heterogenen Gasphasenreaktionen unterschieden.

Ziel der kinetischen Modelle ist es, die Reaktionsgeschwindigkeiten zu bestimmen, um daraus die Quellen beziehungsweise Senken in den Transportgleichungen zu erhalten. Während homogene Gasphasenreaktionen und deren Nutzung in CFD-Programmen besonders für die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen hinreichend gut untersucht und beschrieben sind (siehe Warnatz et al. (2006)), bestehen bei heterogenen Gasphasenreaktionen größere Unsicherheiten, die mehr oder weniger eng mit dem Phasen- und Transportmodell zusammenhängen. Die Wahl der Reaktionskinetik für Feststoffe impliziert demnach immer die Wahl eines entsprechenden Phasen- und Transportmodells. So existieren zwar Modelle zur Beschreibung der Reaktionskinetik von Kohlenstoff mit gasförmigen Bestandteilen, doch sind diese häufig unter Vernachlässigung der inneren Transportvorgänge im Feststoff angegeben. In anderen Veröffentlichungen wird der Stoff- und Energietransport berücksichtigt, weshalb in der numerischen Simulation diese Phasen- und Transportmodelle ebenfalls implementiert werden müssen. Aufgrund des Detaillierungsgrades oder der Nutzung kommerzieller CFD-Software ist das aber nicht immer möglich.

1.4.3.2 Homogene Gasphasenreaktionen

Für **Gasphasenreaktionen** und deren Einbindung in reagierenden Strömungen existieren ausführliche Erörterungen in der Fachliteratur, zum Beispiel in Kee et al. (2003) oder Warnatz et al. (2006). Dort werden folgende Modelle zur Beschreibung der Mikrokinetik chemischer Reaktionen ohne Berücksichtigung von Turbulenz unterschieden:

- unendlich schnelle Reaktion
 - chemisches Gleichgewicht
- } „Fast Chemistry“

- Bruttoreaktionen
- vereinfachte Reaktionsmechanismen
- detaillierte Reaktionsmechanismen

} „Finite-Rate Chemistry“

Die zwei unter „Fast Chemistry“ zusammengefassten Ansätze betrachten nicht den zeitlichen Verlauf der Speziesanteile, sondern gehen von bestimmten Voraussetzungen aus, um auf die Gaszusammensetzung nach der chemischen Reaktion zu schließen. Das Modell der **unendlich schnellen Reaktion** erlaubt keine Koexistenz der Reaktionspartner, wodurch sich immer ein vollständiger Umsatz einstellt. Die Grundannahme beim **chemischen Gleichgewicht** ist, dass die Reaktionspartner eine unendlich lange Zeit zur Reaktion haben.

Das Grundprinzip zur Bestimmung des chemischen Gleichgewichtszustandes ist die Minimierung der freien Enthalpie. Dabei werden keinerlei Informationen zur zeitlichen Änderung der Konzentration der chemischen Spezies benötigt, sondern ausschließlich thermodynamische Stoffdaten für die einzelnen Spezies verwendet. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Open-Source Software CANTERA für Gleichgewichtsberechnungen bei einzelnen Detailuntersuchungen verwendet.

Die drei Ansätze der „Finite-Rate Chemistry“ hingegen modellieren die Reaktionskinetik durch Geschwindigkeitsansätze für die Änderung der Konzentrationen der Reaktionspartner. Die Unterschiede zwischen den drei Ansätzen bestehen nur in der Anzahl und Art der Reaktionen. Während bei **Bruttoreaktionen** und **vereinfachten Reaktionsmechanismen** nur einige wenige Reaktionsgleichungen genutzt werden, die meist 3 oder mehr Reaktanden aufweisen, führen **detaillierte Reaktionsmechanismen** die Reaktionen auf Elementarreaktionen zurück. Gerade bei größeren Molekülen wird die Anzahl der möglichen Elementarreaktionen und der damit verbundenen Elementarspezies aber schnell sehr groß. So nutzt der bekannte Gri-Mech-Mechanismus (Frenklach et al. (2000)), der Kohlenstoffverbindungen mit bis zu drei Kohlenstoffatomen berücksichtigt, 325 Reaktionen und 53 chemische Spezies. Als Geschwindigkeitsansatz für eine einzelne Vorwärtsreaktion kommt meist der um einen Temperaturexponenten β erweiterte Arrhenius-Ansatz

$$\frac{dC_i}{dt} = (\nu_i^{\text{nach}} - \nu_i^{\text{vor}}) \cdot \underbrace{A \cdot T^\beta \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{R \cdot T}\right)}_{k_f} \cdot \prod_{j=1}^{\text{Edukte}} C_j^{O_j} \quad (1.3)$$

zur Anwendung, der die zeitliche Änderung der Konzentration einer Reaktionsspezies C_i in Abhängigkeit der Konzentration der Edukte C_j beschreibt. Die Geschwindigkeitskonstante der Vorwärtsreaktion wird oft auch als k_f bezeichnet und fasst die gekennzeichneten Terme zusammen. In Elementarreaktionen stimmt die Reaktionsordnung O_j mit dem stöchiometrischen Koeffizienten ν_j des jeweiligen Eduktes j überein. In globalen Reaktionen kommen aber meist empirische Korrelationen zum Einsatz, bei denen die Reaktionsordnung nicht dem stöchiometrischen Koeffizienten entsprechen muss. Rückwärtsreaktionen unter Zuhilfenahme von Gleichgewichtsberechnungen können dann zu physikalisch inkonsistenten Einheiten führen, die besondere Behandlung erfordern. In einigen globalen Reaktionen gibt es sogar negative Reaktionsordnungen, was spezielle numerische Lösungsmethoden voraussetzt, da

sonst mit kleinerer Konzentration immer größere Reaktionsgeschwindigkeiten auftreten, die zu numerischen Instabilitäten führen.

Nachfolgend werden wichtige in der Literatur verfügbare Kinetikmodelle für die im Rahmen dieser Arbeit auftretenden Brennstoffe H_2 , CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 und CO aufgeführt.

Der Abbau von Kohlendioxid nach Gleichung (1.5) stammt aus Dryer u. Glassman (1973), gilt im Temperaturbereich von 1030 K-1230 K bei Luftüberschuss und einem Wasseranteil von 0.1 %-3 % und wird in vielen Veröffentlichungen (wie beispielsweise Schneider (2003) und Ströhle (2004)) benutzt und in Fachbüchern (zum Beispiel Kaltschmitt et al. (2009) und Görner (1991)) aufgeführt. In der CFD-Software ANSYS Fluent und ANSYS CFX ist diese Kinetik vordefiniert.



$$\frac{dC_{CO}}{dt} = -2,239 \cdot 10^{12} \frac{m^{2,25}}{kmol^{0,75} \cdot s} \cdot \exp\left(-\frac{1,674 \cdot 10^5 \frac{J}{mol}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{CO} \cdot C_{O_2}^{0,25} \cdot C_{H_2O}^{0,5} \quad (1.5)$$

. Eine Alternative zu dieser Kinetik stammt von Howard et al. (1973) und weist einen größeren Temperaturbereich von 840 K-2360 K auf:



$$\frac{dC_{CO}}{dt} = -1,3 \cdot 10^{11} \frac{m^3}{kmol \cdot s} \cdot \exp\left(-\frac{1,255 \cdot 10^5 \frac{J}{mol}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{CO} \cdot C_{O_2}^{0,5} \cdot C_{H_2O}^{0,5} \quad (1.7)$$

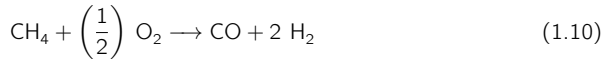
Zur Berücksichtigung des Gleichgewichtes von Kohlenmonoxid und Kohlendioxid wird in Westbrook u. Dryer (1981) die Rückreaktion



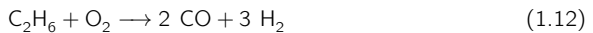
$$\frac{dC_{CO_2}}{dt} = -5 \cdot 10^8 \frac{1}{s} \cdot \exp\left(-\frac{1,674 \cdot 10^5 \frac{J}{mol}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{CO_2} \quad (1.9)$$

angegeben.

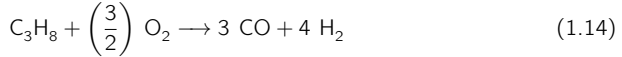
Zur Berechnung der Verbrennungskinetik verschiedener Alkane wird in Jones u. Lindstedt (1988) ein reduzierter 4-Schritt Reaktionsmechanismus vorgestellt, der sowohl für vorgemischte als auch diffusive Flammen geeignet ist und auch in Leiser (2011) Verwendung findet. Zusätzlich ist die Reaktion von Wasserstoff mit Sauerstoff enthalten. Basierend darauf können für die vier Brennstoffe H_2 , CH_4 , C_2H_6 sowie C_3H_8 die Reaktionen und ihre Kinetik mit



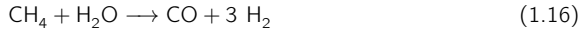
$$\frac{dC_{CH_4}}{dt} = -4,4 \cdot 10^{11} \frac{m^{2,25}}{kmol^{0,75} \cdot s} \cdot \exp\left(-\frac{1,255 \cdot 10^5 \frac{J}{mol}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{CH_4}^{0,5} \cdot C_{O_2}^{1,25} \quad (1.11)$$



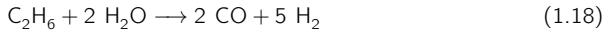
$$\frac{dC_{C_2H_6}}{dt} = -4,2 \cdot 10^{11} \frac{m^{2,25}}{kmol^{0,75} \cdot s} \cdot \exp\left(-\frac{1,255 \cdot 10^5 \frac{J}{mol}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{C_2H_6}^{0,5} \cdot C_{O_2}^{1,25} \quad (1.13)$$



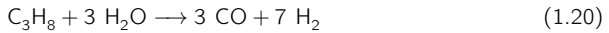
$$\frac{dC_{\text{C}_3\text{H}_8}}{dt} = -4,0 \cdot 10^{11} \frac{\text{m}^{2,25}}{\text{kmol}^{0,75} \cdot \text{s}} \cdot \exp\left(-\frac{1,255 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{\text{C}_3\text{H}_8}^{0,5} \cdot C_{\text{O}_2}^{1,25} \quad (1.15)$$



$$\frac{dC_{\text{CH}_4}}{dt} = -3,0 \cdot 10^8 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{s}} \cdot \exp\left(-\frac{1,255 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{\text{CH}_4} \cdot C_{\text{H}_2\text{O}} \quad (1.17)$$



$$\frac{dC_{\text{C}_2\text{H}_6}}{dt} = -3,0 \cdot 10^8 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{s}} \cdot \exp\left(-\frac{1,255 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{\text{C}_2\text{H}_6} \cdot C_{\text{H}_2\text{O}} \quad (1.19)$$



$$\frac{dC_{\text{C}_3\text{H}_8}}{dt} = -3,0 \cdot 10^8 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{s}} \cdot \exp\left(-\frac{1,255 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{\text{C}_3\text{H}_8} \cdot C_{\text{H}_2\text{O}} \quad (1.21)$$



$$\begin{aligned} \frac{dC_{\text{H}_2}}{dt} = & -2,5 \cdot 10^{16} \frac{\text{m}^{2,25} \cdot \text{K}}{\text{kmol}^{0,75} \cdot \text{s}} \cdot T^{-1} \cdot \exp\left(-\frac{1,674 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{\text{H}_2}^{0,5} \cdot C_{\text{O}_2}^{2,25} \cdot C_{\text{H}_2\text{O}}^{-1} \\ & + E_C \cdot \frac{2,5 \cdot 10^{16} \frac{\text{m}^{2,25} \cdot \text{K}}{\text{kmol}^{0,75} \cdot \text{s}}}{K_{C,1}} \cdot \exp\left(-\frac{1,674 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{\text{H}_2\text{O}} \end{aligned} \quad (1.23)$$



$$\begin{aligned} \frac{dC_{\text{CO}}}{dt} = & -2,75 \cdot 10^9 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{s}} \cdot \exp\left(-\frac{8,368 \cdot 10^4 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{\text{CO}} \cdot C_{\text{H}_2\text{O}} \\ & + \frac{2,75 \cdot 10^9}{K_{C,2}} \frac{\text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{s}} \cdot \exp\left(-\frac{8,368 \cdot 10^4 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{\text{CO}_2} \cdot C_{\text{H}_2} \end{aligned} \quad (1.25)$$

angegeben werden. $K_{C,1}$ und $K_{C,2}$ bezeichnen die chemischen Gleichgewichtskonstanten (in Konzentrationseinheiten) der jeweiligen Gleichgewichtsreaktion und berechnen sich definitionsgemäß aus dem Quotienten der Vorwärts- und Rückwärtsgeschwindigkeitskonstanten (k_f und k_b) nach Gleichung (1.26) aus

$$K_C = \frac{k_f}{k_b}. \quad (1.26)$$

Nach thermodynamischen Gesetzmäßigkeiten müssen sich nach unendlich langer Zeit die Gleichgewichtskonzentrationen einstellen, die aus der Elementarbilanz (und somit den stöchiometrischen Koeffizienten) folgen. Die Relation von chemischer Gleichgewichtskonstante K_C und thermodynamischer Gleichgewichtskonstante K ist durch

$$K_C = K \cdot \left(\frac{p^+}{\bar{R} \cdot T} \right)^{\sum \nu_i} \quad (1.27)$$

gegeben, wobei $\sum \nu_i$ der Summe der stöchiometrischen Koeffizienten der entsprechenden Reaktion und p^+ dem Standarddruck entsprechen. Die thermodynamische Gleichgewichtskonstante wird durch die molare freie Reaktionsenthalpie $\Delta_R \bar{g}$ nach

$$K = e^{-\frac{\Delta_R \bar{g}}{\bar{R} \cdot T}} \quad (1.28)$$

beschrieben und ist zwangsläufig dimensionslos⁴. Nach Kombination von Gleichung (1.26) mit (1.27)

$$K_C = \frac{k_f}{k_b} = K \cdot \left(\frac{p^+}{\bar{R} \cdot T} \right)^{\sum \nu_i} \quad (1.29)$$

wird ein Problem bei der Simulation von globalen Reaktionsmechanismen mit nichtstöchiometrischen Koeffizienten und unter Gleichgewichtsbedingungen deutlich: Die Einheit der Rückwärtsgeschwindigkeitskonstante k_b hängt gemäß Gleichung (1.29) von der Einheit der Vorwärtsgeschwindigkeitskonstante und der Stöchiometrie ab. Nichtstöchiometrische Koeffizienten bei Vorwärts- oder Rückwärtsgeschwindigkeit erfüllen nicht unbedingt diese Bedingung und es können sich somit unstimmgie Einheiten und physikalisch unsinnige Ergebnisse ergeben. Für Gleichung (1.22) sind beispielsweise

$$k_f = 2,5 \cdot 10^{16} \frac{\text{m}^2,25 \cdot \text{K}}{\text{kmol}^{0,75} \cdot \text{s}} \cdot T^{-1} \cdot \exp \left(-\frac{1,674 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T} \right) \quad (1.30)$$

und

$$k_b = \frac{2,5 \cdot 10^{16} \frac{\text{m}^2,25 \cdot \text{K}}{\text{kmol}^{0,75} \cdot \text{s}}}{K_{C,1}} \cdot \exp \left(-\frac{1,674 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T} \right) \quad (1.31)$$

mit einer chemischen Gleichgewichtskonstante von

$$K_{C,1} = K \cdot \left(\frac{p^+}{\bar{R} \cdot T} \right)^{-0,5} \rightarrow [K_{C,1}] = \left(\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \right)^{-0,5}. \quad (1.32)$$

In Gleichung (1.22) muss deshalb der Einheiten-Korrekturfaktor E_C eingeführt werden, ohne den die Vorwärts- und Rückwärtsgeschwindigkeit unterschiedliche Einheiten aufweisen, was zu inkonsistenten Einheiten führt. Darüber hinaus weist die Vorwärtsreaktion auch einen Temperaturexponenten auf, die Rückwärtsreaktion aber nicht. Dadurch kommt es ebenfalls zu einer Einheiteninkonsistenz. Ursache dieses Problems sind die Ansatzfunktionen für die Geschwindigkeiten der Vorwärts- und Rückwärtsreaktionen bei der Ermittlung der Kinetik.

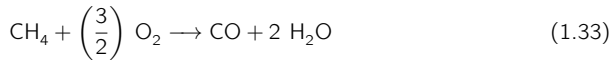
⁴Exponenten dürfen keine Einheit aufweisen.

Die dargestellten Geschwindigkeitsansätze geben die ursprünglich zur Parameteranpassung genutzten Daten in einem bestimmten Zeitintervall gut wieder, wurden aber nicht unter dem Gesichtspunkt des thermodynamischen Gleichgewichts erstellt.

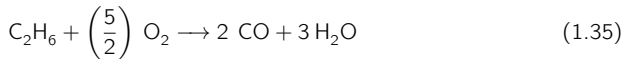
Aus diesen Gründen muss an dieser Stelle der erwähnte Einheiten-Korrekturfaktor E_C eingeführt werden, der die Einheiten angleicht. Die meisten Software-Pakete (zum Beispiel CANTERA und Chemkin-II) verzichten auf eine solche Korrektur und erlauben diese Art von Reaktionen nicht. In der Software ANSYS CFX ist dagegen sowohl die unphysikalische Formulierung (mit einem Warnhinweis) als auch eine Korrektur des präexponentiellen Faktors möglich.

Für die Reaktion von Wasserstoff mit Sauerstoff nach Gleichung (1.23) sind in Jones u. Lindstedt (1988) verschiedene präexponentielle Faktoren für verschiedene Alkane angegeben. Der hier aufgeführte und in späteren Berechnungen genutzte Wert entspricht dem Wert des Reaktionsmechanismus von Methan.

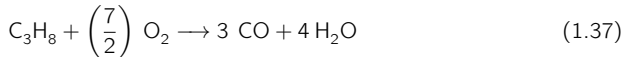
In Westbrook u. Dryer (1981) wird ein weiterer vereinfachter Reaktionsmechanismus für die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen beschrieben, der auch in der CFD-Software ANSYS Fluent und ANSYS CFX vordefiniert ist. Die darin vorkommenden Parameter wurden durch Anpassung eines theoretischen Modells zur Berechnung der laminaren Flammgeschwindigkeit zu



$$\frac{dC_{\text{CH}_4}}{dt} = -1,5 \cdot 10^7 \frac{1}{s} \cdot \exp\left(-\frac{1,255 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{\text{CH}_4}^{-0,3} \cdot C_{\text{O}_2}^{1,3} \quad (1.34)$$



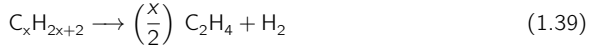
$$\frac{dC_{\text{C}_2\text{H}_6}}{dt} = -7,31 \cdot 10^9 \frac{\text{m}^{2,25}}{\text{kmol}^{0,75} \cdot s} \cdot \exp\left(-\frac{1,255 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{\text{C}_2\text{H}_6}^{0,1} \cdot C_{\text{O}_2}^{1,65} \quad (1.36)$$



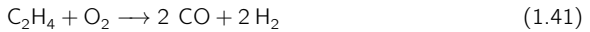
$$\frac{dC_{\text{C}_3\text{H}_8}}{dt} = -5,62 \cdot 10^9 \frac{\text{m}^{2,25}}{\text{kmol}^{0,75} \cdot s} \cdot \exp\left(-\frac{1,255 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{\text{C}_3\text{H}_8}^{0,1} \cdot C_{\text{O}_2}^{1,65} \quad (1.38)$$

ermittelt. Wasserstoff und seine Reaktionen bleiben in dieser Quelle unberücksichtigt.

In Hautman et al. (1981) wird ebenfalls ein vereinfachter Mechanismus für Alkane vorgestellt, auf den in Görner (1991) Bezug genommen wird. Die Kinetik der Verbrennung von aliphatischen Kohlenwasserstoffen C_xH_{2x+2} wird darin mit



$$\frac{dC_{C_xH_{2x+2}}}{dt} = -2,57 \cdot 10^{14} \frac{m^{2,91}}{kmol^{0,97} \cdot s} \cdot \exp\left(-\frac{2,075 \cdot 10^5 \frac{J}{mol}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{C_xH_{2x+2}}^{0,5} \cdot C_{H_2}^{1,07} \cdot C_{C_2H_4}^{0,4} \quad (1.40)$$



$$\frac{dC_{C_2H_4}}{dt} = -3,72 \cdot 10^{12} \frac{m^{2,13}}{kmol^{0,71} \cdot s} \cdot \exp\left(-\frac{2,092 \cdot 10^5 \frac{J}{mol}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{C_2H_4}^{0,9} \cdot C_{O_2}^{1,18} \cdot C_{C_xH_{2x+2}}^{0,37} \quad (1.42)$$



$$\frac{dC_{H_2}}{dt} = -2,45 \cdot 10^{11} \frac{m^{2,13}}{kmol^{0,71} \cdot s} \cdot \exp\left(-\frac{1,715 \cdot 10^5 \frac{J}{mol}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{H_2}^{0,85} \cdot C_{O_2}^{1,42} \cdot C_{C_2H_4}^{-0,56} \quad (1.44)$$

beschrieben und wurde aus Experimenten an einem Pfropfenströmungsreaktor abgeleitet. Die dort angegebene Reaktion von Kohlenmonoxid zu Kohlendioxid entstammt aus Dryer u. Glassman (1973) und entspricht den Gleichungen (1.4) und (1.5).

Für den Fall turbulenter Strömung, in der die Vermischung der Reaktionspartner die Reaktion bestimmt, existieren weitere Ansätze, um die Reaktionsgeschwindigkeit zu berechnen. So wird beim „*Eddy Dissipation Model*“ (EDM) nach Magnussen u. Hjertager (1976) die Reaktionsgeschwindigkeit direkt aus den Turbulenzparametern mit

$$\frac{dC_i}{dt} = (\nu_i^{nach} - \nu_i^{vor}) \cdot A_{EDM} \cdot \frac{\varepsilon}{k} \cdot \min\left(\frac{C_j}{\nu_i^{vor}}\right)_{j=Edukte} \quad (1.45)$$

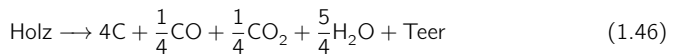
berechnet. Mit dem „*Advanced Eddy Dissipation Model*“ hingegen (siehe ANSYS FLUENT (2011)) werden sowohl die turbulente Reaktionsgeschwindigkeit aus dem „*Eddy-Dissipation-Modell*“, als auch die chemische Reaktionsgeschwindigkeit aus den „*Finite Rate Chemistry*“-Ansätzen berechnet. Die größere der beiden wird verworfen und die kleinere als limitierende Reaktionsgeschwindigkeit genutzt. Problematisch daran ist, dass bei mehreren Reaktionsschritten für jede Reaktion eine andere chemische, aber immer die gleiche turbulente Reaktionsgeschwindigkeit ermittelt wird. Alle Reaktionen laufen somit gleich schnell ab, so dass mögliche Zwischenprodukte genauso schnell gebildet wie abgebaut werden und damit effektiv nicht vorhanden sind, beziehungsweise sein können. Diese Situation (chemische Reaktionskinetik größer als die turbulente) tritt oft unmittelbar nach erfolgter Zündung auf, so dass diese Ansätzen nicht mit mehreren Reaktionsschritten und Zwischenprodukten verwendet werden sollten.

1.4.3.3 Heterogene Reaktionen und Feststoffreaktionen

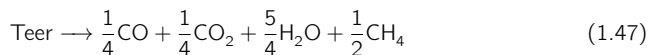
In Specht (1993) werden die Kinetik heterogener Reaktionen bei der Umsetzung von Kohlenstoff mit Sauerstoff und die damit verbundenen Phasen- und Transportmodelle umfassend beschrieben. Auf biogene Brennstoffe wird nicht eingegangen.

Viele der gefundenen Quellen zur Beschreibung der Umsetzung fester Biomasse haben ihren Ursprung in der Vergasungstechnik. Ein guter Einstieg in die Thematik und zusammenfassender Überblick sind in Di Blasi (2009) zu finden. Alle beim Phasen- und Transportmodell aufgelisteten Veröffentlichungen greifen auf „*Finite-Rate*“-Ansätze mit dem modifizierten Arrheniusansatz zurück.

Als Reaktionsmechanismus für die Feststoffreaktionen kommen oft vereinfachte Bruttoreaktionen zum Einsatz. So wird beispielsweise in Schneider (2003) das Holz als $C_6H_9O_4$ angenommen und reagiert nach



unvollständig zu festem Kohlenstoff, Kohlendioxid, Kohlenmonoxid, Wasser und Teer, das als $CH_{4,5}O_2$ angegeben wird. Das Teer wird über die Gleichung



umgesetzt. Diese und ähnliche Vorgehensweisen mit unterschiedlichen stöchiometrischen Koeffizienten sind auch in anderen Veröffentlichungen in der Vergasungstechnik (zum Beispiel in Di Blasi (2008) oder auch in Kobayashi et al. (2009)) zu finden. Die Schwierigkeit bei diesen Modellen liegt in der schlechten Anwendung in CFD-Simulationen zur Holzverbrennung, da als Reaktionsprodukt fester Kohlenstoff und Teer entsteht beziehungsweise entstehen kann. In Verbrennungen hingegen wird nahezu der gesamte Kohlenstoff zu gasförmigen Produkten umgesetzt, weshalb der feste Kohlenstoff und Teer Zwischenprodukte darstellen, deren Modellierung die numerische Simulation erheblich erschwert.

1.4.4 Mittelungsmethoden bei turbulenter Strömung

Verbrennungsrechnungen verwenden zusätzliche Gleichungen für den Speziestransport unter Einbeziehung der Größen (Geschwindigkeit, Druck, etc.) aus den Navier-Stokes-Gleichungen. Werden diese gemittelt, so wird der chemische Quellterm in den Transportgleichungen der Spezies ebenfalls zu einem gemittelten Term. Für die Modellierung dieser mittleren Reaktionsrate gibt es folgende Ansätze:

- Vernachlässigung turbulenter Einflüsse
- Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen („*Probability Density Functions - PDF*“)

Durch die Nichtlinearität der Reaktionskinetik ist die mittlere Reaktionsrate keine Funktion der mittleren reaktionsbeeinflussenden Parameter. Je komplexer die Kinetikmodelle und je turbulenter die Strömung, desto größer wird der Fehler bei Vernachlässigung dieser Nichtlinearität.

Vernachlässigung turbulenter Einflüsse Dieser Ansatz liefert nur bei laminarer Strömung exakte Ergebnisse, da die zeitlichen Schwankungen der die Reaktionskinetik beeinflussenden Parameter (Temperatur und mischungsbeschreibende Variablen) unberücksichtigt bleiben. Der chemische Quellterm berechnet sich direkt aus dem Kinetikmodell und damit aus den mittleren Variablen. In Kombination mit empirischen Kinetikmodellen für turbulente Strömungen liefert dieses Modell aber häufig eine ausreichende Genauigkeit.

Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDF) Um komplexere Zusammenhänge zwischen turbulenter Strömung und Reaktionsgeschwindigkeit zu beschreiben, dürfen die zeitlichen Schwankungen der Variablen nicht ignoriert werden, da bei zeitlich stark fluktuierenden Variablen diese Modelle falsche mittlere Reaktionsraten bestimmen. Daher müssen nicht nur Transportgleichungen für den Mittelwert der mischungsbeschreibenden, reaktionsbeeinflussenden und schwankenden Parameter (Mischungsanteil, Speziesmassenanteil), sondern auch für die Schwankung dieser Parameter gelöst werden. Weiterhin müssen, um den zeitlichen Mittelwert der chemischen Quellen zu bestimmen, die Quellterme für alle durch turbulente Schwankungen vorkommenden Kombinationen von Momentanwerten der Parameter gemittelt werden. Um die Häufigkeit bestimmter Kombination zu beschreiben, werden Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen („*Probability Density Functions - PDF*“) für die schwankenden Größen verwendet, die angeben, wie wahrscheinlich die fluktuierende Größe in einem bestimmten Intervall liegt.

Um die PDF an einer bestimmten Koordinate zu bestimmen, gibt es zwei Möglichkeiten. Entweder die Nutzung einer vorgegebenen (angenommenen) („*Presumed PDF - PPDF*“) oder die Aufstellung und Lösung einer Transportgleichung für die Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion („*Joint PDF - JPDF*“ mehrerer physikalischer Größen (siehe Pope (2000))).

Bei PPDF-Methoden beschreibt **eine** eindimensionale, angenommene, analytisch bestimmbare Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion die Verteilung für **einen** reaktionsbeeinflussenden und schwankenden Parameter. Für jeden Einflussparameter der PDF wiederum wird eine Transportgleichung gelöst. Die bekanntesten PDF-Formen sind Doppel/Dreifach-Delta-Funktion, die abgeschnittene Gauss-Verteilung und die β -PDF Verteilung.

Die JPDF-Methoden lösen die allgemeine mehrdimensionale PDF-Transportgleichung für **mehrere** reaktionsbeeinflussende und schwankende Parameter. Zur Lösung dieser Transportgleichung können keine Finite-Volumen-Methoden verwendet werden. Eine Möglichkeit bieten Monte-Carlo-Methoden, welche allerdings einen erheblichen, in der industriellen Praxis noch nicht realisierbaren Rechenaufwand erfordern.

Durch Annahme von statistischer Unabhängigkeit der Einflussgrößen können zwar JPDFs durch mehrere eindimensionale, angenommene PDFs konstruiert werden, jedoch fällt die Legitimierung dieser Annahme mit zunehmender Anzahl der Einflussgrößen immer schwerer.

1.4.5 Thermische Strahlung

1.4.5.1 Einführung

Bei Verbrennungsvorgängen spielt die thermische Strahlung für die Temperaturverteilung (und somit auch für die Heizleistung) eine große Rolle und muss berücksichtigt werden. Von besonderer Wichtigkeit ist dabei der Fakt, dass nicht nur die thermische Strahlung von Oberflächen zueinander, sondern auch der Strahlungsaustausch der Gasvolumina untereinander (Gasstrahlung) betrachtet werden muss. Durch das Vorhandensein von Kohlendioxid und Wasser wird die Gasstrahlung bedeutsam, was die mathematische Modellierung enorm erschwert. Die nachfolgende Beschreibung soll deshalb einen groben Überblick über den physikalischen Hintergrund und die grundsätzlichen Schwierigkeiten und Lösungsansätze bei der thermischen Strahlung von Gasen geben. Für weiterführende Literatur sei auf Modest (2001) und Siegel et al. (1993) verwiesen.

Im Gegensatz zum konvektiven Wärmetransport wird kein Medium für die Energieübertragung benötigt, sondern die Energie wird durch elektromagnetische Wellen transportiert, wobei der Wellenlängenbereich von etwa $0,8\text{ }\mu\text{m}$ bis $1000\text{ }\mu\text{m}$ reicht. Jeder Stoff, unabhängig von seinem Aggregatzustand, emittiert ab einer Temperatur größer null Kelvin mehr oder weniger von dieser Strahlung, die aus nicht teilbaren Energiebeträgen besteht, den Photonen oder auch Lichtquanten genannt.

Bei der Interaktion von Photonen mit Atomen oder Molekülen können gebundene Elektronen zu gebundenen Elektronen auf einem anderen Energieniveau umgewandelt werden, was zu einer diskreten Energieänderung führt. Es werden nur Photonen bestimmter Frequenzen (Linien) absorbiert beziehungsweise emittiert. Diese Prozesse werden deshalb auch als Linienprozesse bezeichnet. Bei mehratomigen Gasen beziehungsweise Molekülen können Linienprozesse neben der Änderung des Energiezustandes eines Elektrons auch eine Änderung des Rotations- oder Vibrationszustandes bewirken.

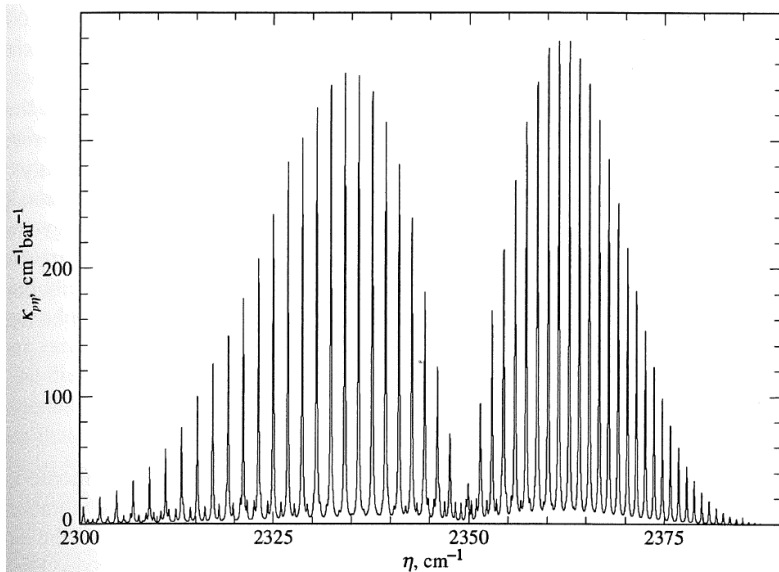


Abbildung 1.2: Spektraler Absorptionskoeffizient im Wellenlängenbereich um $4.3\ \mu\text{m}$ von Kohlendioxid in Stickstoff bei 296 K und 100 kPa (entnommen aus Modest (2001))

Linienprozesse zeigen in ihren Spektren eine Reihe von Peaks. Beispielhaft dafür ist das Spektrum von Kohlendioxid in Abbildung 1.2. Die einzelnen Spektrallinien haben dabei eine endliche Breite aufgrund bestimmter Effekte (natürliche Linienverbreiterung, Doppler-Verbreiterung, Stoßverbreiterung, Stark-Verbreiterung), welche in Siegel et al. (1993) eingehend beschrieben werden. Wie in Abbildung 1.3 erkennbar, sind die Spektrallinien druck- und temperaturabhängig, wodurch eine Modellierung und schließlich Anwendung in ingenieurwissenschaftlichen Berechnungen erheblich erschwert werden.

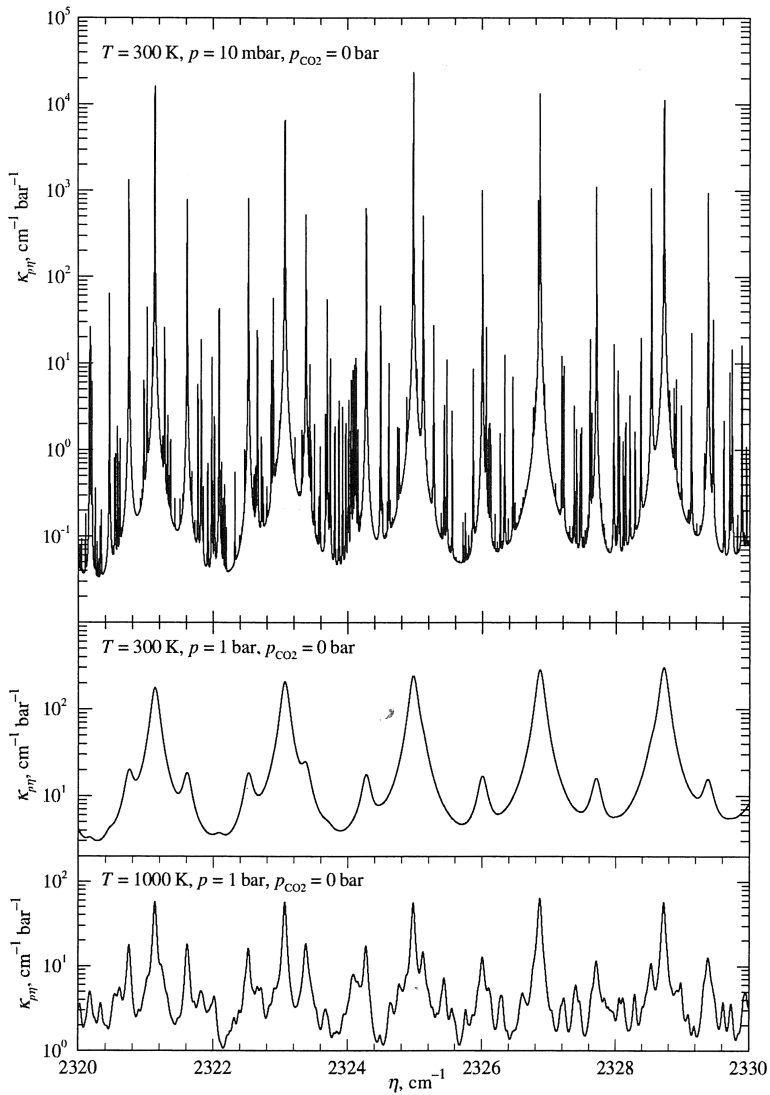


Abbildung 1.3: Spektraler Absorptionskoeffizient im Wellenlängenbereich um $4.3 \mu\text{m}$ von Kohlendioxid in Stickstoff bei verschiedenen Temperaturen und Drücken (entnommen aus Modest (2001))

In bestimmten, für ein Gas charakteristischen Wellenlängenbereichen können die Spektrallinien zu Banden zusammengefasst werden. Abbildung 1.4 stellt den Absorptionsgrad von Kohlendioxid dar, wobei die in Abbildung 1.2 gezeigten Peaks der 4,3 μm -Banden zusammengefasst wurden.

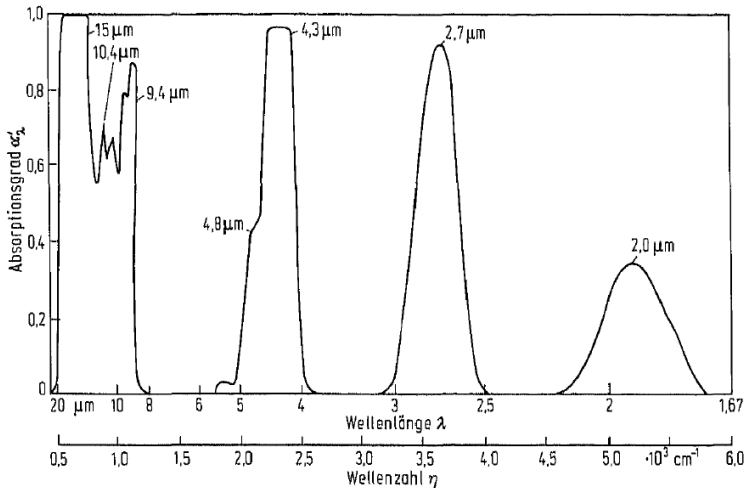


Abbildung 1.4: Absorptionsspektrum von Kohlendioxid bei 830 K und 101,33 kPa nach Durchgang durch eine Gasschicht der Länge 0,388 m (entnommen aus Siegel et al. (1993))

Ausgehend von dieser kurzen phänomenologischen Einführung zum Strahlungsverhalten von Gasen soll nachfolgend beschrieben werden, wie die Strahlung in Räumen berechnet werden kann.

Eine sehr einfache Möglichkeit der Berücksichtigung der Strahlung ist die Annahme eines optisch dünnen Mediums (engl.: „*optically thin*“), d.h. Vernachlässigung von Absorption sowie konstanter Umgebungstemperatur. Das teilnehmende Gas emittiert seine Energie direkt an die Umgebung, weshalb der emittierte Wärmestrom direkt aus dem Planckschen Absorptionskoeffizienten und der Differenz der vierten Potenzen der lokalen und Umgebungstemperatur bestimmt werden kann.

Eine weitere einfache Möglichkeit zur Berücksichtigung thermischer Strahlung ist die Annahme eines optisch dichten Mediums, d.h. die emittierte Strahlung wird schon nach einem sehr kurzen Weg absorbiert und es ergibt sich direkt ein erhöhter Energietransport. Physikalisch kann dieser Effekt durch eine stärkere Wärmeleitung beschrieben werden, was gleichbedeutend mit einer stärkeren Energiediffusion bzw. einem höheren Wärmeleitkoeffizienten ist. Diese Annahme wird daher auch Diffusionsannahme (engl.: „*Diffusion Approximation*“) genannt. Die thermische Strahlung wird somit indirekt über den Wärmetransport berücksichtigt.

In allen weiteren Verfahren zur Berechnung thermischer Strahlung wird eine neue Variable eingeführt: die spektrale Strahlungsintensität (auch spektrale Strahldichte genannt), welche die Strahlung an jedem Ort im Raum charakterisiert. Für diese wird eine Integro-Differenzialgleichung aufgestellt, die die Änderung der Strahlungsintensität entlang des Weges eines Strahles in Abhängigkeit des Absorptionskoeffizienten beschreibt und die in Kapitel 3.2.8 ausführlich dargestellt wird. Da es sich darüber hinaus um eine spektrale, d.h. wellenlängenabhängige Variable handelt, gilt diese Gleichung prinzipiell nur für einen sehr kleinen Wellenlängenbereich. Soll ein Raum hinsichtlich des Strahlungstransfers zwischen seinen Begrenzungsflächen untereinander und mit den strahlungsaktiven Komponenten im Gas modelliert werden, so muss jeder Punkt des Raumes in jede mögliche Richtung von mindestens einem Strahl für jede Wellenlänge durchdrungen werden.

Es sind somit zwei grundsätzliche Schwierigkeiten bei der Berechnung der thermischen Strahlung zu überwinden: einerseits ist der Raum abzubilden, wobei die Weg- und Winkelabhängigkeit berücksichtigt werden muss, andererseits muss der Wellenlängenabhängigkeit Rechnung getragen werden.

Die erste Schwierigkeit wird mittels Methoden zur Lösung der Strahlungstransportgleichung behandelt (d.h. die Aufstellung und Modifizierung der ursprünglichen Strahlungsübertragungsgleichung), die zweite durch die verschiedenen Ansätze für die Strahlungseigenschaften der Gase, also des spektralen Verhaltens.

Ziel der Lösung der Strahlungstransportgleichung ist für ingenieurtechnische Anwendungen hauptsächlich der integrale (über die Wellenlängen) Strahlungswärmestrom und dessen Divergenz. Mittels dieser Größen kann dann die thermische Strahlung in die Energietransportgleichung eingebunden werden.

1.4.5.2 Methoden zur Lösung der Strahlungstransportgleichung

Um die Winkel- und Wegabhängigkeit der thermischen Strahlung zu beschreiben, müssen bestimmte Vereinfachungen und Annahmen getroffen werden. Nach Modest (2001) S.283 lassen sie sich in vier Kategorien unterteilen:

- Nutzung von **Kugelflächenfunktionen** („*Spherical Harmonics*“) - P_N -Methoden
- Umwandlung in **Diskrete-Ordinaten** („*Discrete Ordinates*“) - S_N -Methoden
- Anwendung von **Monte Carlo**-Methoden
- Hybride Methoden (zum Beispiel **Diskrete Übertragung**, „*Discrete Transfer*“)

Bei der Methode unter Verwendung von **Kugelflächenfunktionen** wird die orts- und richtungsabhängige Strahlungsintensität durch eine Skalarfunktion auf einer Kugeloberfläche um den Ort dargestellt. Skalarfunktionen auf Kugeloberflächen können als eine Art zweidimensionaler Fourier-Reihen in Abhängigkeit der Winkel (polar und azimuth) - den Kugelflächenfunktionen - dargestellt werden. Die Winkelabhängigkeit der Strahlungsintensität wird somit vernachlässigt und die Genauigkeit ergibt sich durch die Anzahl der berücksichtigten Reihenglieder. Aus der Integro-Differenzialgleichung wird je nach Anzahl der Reihenglieder eine Anzahl von partiellen Differenzialgleichungen vom Typ der inhomogenen Helmholtzgleichung, die mit

Finite-Volumen-Methoden gelöst werden können. In der verwendeten Software ANSYS CFX wird nach dem ersten Reihenglied abgebrochen und es ergibt sich die P_1 -Methode, die in optisch dünnen Medien nur bedingt einsetzbar ist.

Mit Hilfe der Methode der **Diskrete-Ordinaten** wird die Strahlungstransportgleichung in eine endliche Anzahl von Richtungen zerlegt, die den gesamten Kugelraum beschreiben. Das Richtungsintegral wird so durch eine Summenfunktion dargestellt und es entsteht eine Anzahl von linearen, partiellen Differentialgleichungen erster Ordnung, die wiederum besser lösbar sind als die ursprüngliche Integro-Differentialgleichung. Es handelt sich demnach um eine **Finite-Differenzen**-Methode, angewandt auf die Winkelabhängigkeit der Strahlungstransportgleichung. Eine Variation davon stellt die **Finite-Volumen**-Methode der Strahlungstransportgleichung dar, bei der eine endliche Anzahl von Raumwinkelvolumen genutzt wird.

Nach der **Monte Carlo**-Methode wird die thermische Strahlung durch eine große Anzahl von Photonenbündeln repräsentiert, deren Bewegung, Absorption und Emission durch stochastische Differentialgleichungen beschrieben werden kann. Die Richtung, der Energieanteil an der gesamten emittierten Energie und die Wellenlängen eines konkreten Photonenbündels unterliegen einer Zufallsverteilung (daher der Name „Monte Carlo“), wodurch sich ein stochastischer Fehler ergibt, der mit größerer Anzahl der Photonenbündel bzw. deren Geschichte (engl. „*history*“) kleiner wird.

Hybride Methoden nutzen mehrere der bisher genannten Methoden gleichzeitig. So ist beispielsweise die im Rahmen dieser Arbeit genutzte Methode der **Diskreten Übertragung** („**Discrete Transfer**“) (nach Lockwood u. Shah (1981)) eine Kombination aus Monte Carlo und Diskrete-Ordinaten. Dabei wird eine Strahlenverfolgung in eine Anzahl von Raumrichtungen, ausgehend von jedem Flächenelement, durchgeführt. Allerdings werden die Strahlen beim Start der Rechnung definiert und danach nicht mehr verändert. Diese Methode wird in Abschnitt 3.2.8 ausführlicher beschrieben.

1.4.5.3 Strahlungseigenschaften der Gase

Die einfachste Möglichkeit, um die Strahlungseigenschaften von teilnehmenden Gasen zu beschreiben, ist die Vernachlässigung der Wellenlängenabhängigkeit durch die Annahme, dass es sich bei dem Gas um einen grauen Strahler bzw. ein graues Gas handelt (eng.: „*gray gases*“). Graue Gase emittieren nur einen Teil der maximal möglichen Strahlung des Schwarzen Strahlers. Die emittierte, spektrale Strahlungsintensität grauer Strahler lässt sich somit aus der emittierten Strahlungsintensität schwarzer Strahler (dem Planckschen Gesetz) und einem Faktor zwischen null und eins angeben. Die Strahlungstransportgleichung wird wellenlängenunabhängig und es bleibt der effektive Absorptionskoeffizient als Strahlungseigenschaft, der meist global als konstant angenommen wird, aber auch in Abhängigkeit der lokalen Gaszusammensetzung angegeben werden kann, was aber aufgrund der starken Abhängigkeit von Absorptionskoeffizient, Temperatur und Gaszusammensetzung zu großen Fehlern führen kann.

Eine Verringerung der Fehler kann nur durch Beschreibung des spektralen Verhaltens der teilnehmenden Gase erreicht werden, was durch Spektralmodelle erfolgt. Diese können nach

Modest (2001) in vier verschiedene Gruppen eingeteilt werden (in abnehmender Komplexität und Genauigkeit):

- Linie-für-Linie-Modelle („*line-by-line models*“)
- Schmalband-Modelle („*narrow band models*“)
- Breitband-Modelle („*wide band models*“)
- Globalmodelle („*global band models*“)

Je nach verwendetem Spektralmodell werden unterschiedliche Strahlungseigenschaften beschrieben, was sich auch auf die Lösung der Strahlungstransportgleichung auswirkt. So wird beispielsweise bei den Bandenmodellen (Schmal- und Breitband) der Transmissionsgrad bzw. Emissionsgrad der jeweiligen Banden berechnet. Diese Strahlungseigenschaften lassen sich aber nicht in der ursprünglichen Form der Strahlungstransportgleichung nutzen, die den Absorptionskoeffizienten enthält. Aus diesem Grund kommen entweder weitere Korrelationen zur Berechnung des Absorptionskoeffizienten aus dem Transmissions- oder Emissionsgrad zum Einsatz, oder es werden modifizierte Strahlungstransportgleichungen verwendet, die direkt den Transmissions- oder Emissionsgrad nutzen.

Linie-für-Linie („*Line-By-Line Models*“) Diese Methode nutzt detaillierte Informationen jeder einzelnen Spektrallinie, löst die Strahlungstransportgleichung für mehrere hundert Wellenlängen einzeln und integriert anschließend über das gesamte Spektrum. Sie gibt die Spektren nahezu exakt wieder, setzt aber extreme Rechnerkapazitäten oder stark vereinfachte Simulationen voraus. Darüber hinaus existieren für viele Gase keine Spektren hoher Auflösung und werden unter Umständen auch in naher Zukunft nicht verfügbar sein. Die Datenbank HITRAN (Rothman et al. (2009)) ist Ergebnis mehrerer Jahre Arbeit, wird ständig weiter verbessert und besteht aus Daten, die im Bereich atmosphärischer Bedingungen (niedrige Partialdrücke und Umgebungstemperatur) liegen. Die Temperatur- und Druckabhängigkeit ist laut Modest (2001) aber immer noch zu wenig verstanden, um eine Extrapolation zu typischen Verbrennungsbedingungen vorzunehmen. Als obere Temperatur werden 500 K angegeben. Aufbauend darauf wurde durch Extrapolation für ausgewählte Gase die Datenbank HITEMP (Rothman et al. (2010)) entwickelt, deren Obergrenze mit 1000 K spezifiziert wird.

Schmalband-Modelle Modelle dieser Art beschreiben die Banden durch die einzelnen Linien (Form, Breite und Abstände zueinander). Hintergrund dafür ist, dass der Absorptionskoeffizient sehr stark innerhalb des kleinen Wellenlängenbereiches einer Linie schwankt, während die emittierte Energie des schwarzen Strahlers nahezu konstant bleibt. Zu den bekanntesten gehören das Elsasser-Modell und die statistischen Modelle von Goody und Malkmus („*statistical narrow band*“ (SNB)), die in Modest (2001) ausführlich beschrieben werden. Diese Modelle können die Genauigkeit der Linie-für-Linie-Modelle erreichen, sind allerdings für Gasgemische nur mit weiteren Modifikationen einsetzbar, da sich die verschiedenen Spektren der unterschiedlichen Gase überlappen.

Neben den bisher erwähnten „traditionellen“ Schmalbandenmodellen (Elsasser und statistische Schmalbandenmodelle) wurden k -Verteilungsmodelle („*k-Distribution-Models*“) entwi-

ckelt. Wie in Abbildung 1.3 erkennbar, wiederholen sich die Maxima des Absorptionskoeffizienten in einem kleinen Wellenlängenbereich, was für eine Integration zur Ermittlung des mittleren Absorptionskoeffizienten ungeeignet ist. Darüber hinaus ist die Position der Maxima für die Integration nicht von Bedeutung. Aus diesem Grund kann der Verlauf des Absorptionskoeffizienten in Abhängigkeit von der Wellenzahl umgeordnet werden und durch eine neue Variable (k) beschrieben werden, die über eine künstliche, dimensionslose Wellenzahl variiert. Der Absorptionskoeffizient in Abhängigkeit von der künstlichen Wellenlänge kann somit durch eine stetige Funktion beschrieben werden (innerhalb eines gewissen Wellenlängenbereiches). Die Berechnung des Absorptionsparameters erfolgt durch (meist numerische) Integration.

Breitband-Modelle Diese Modelle gehen einen Schritt weiter als die Schmalbandenmodelle und postulieren, dass die Energie des schwarzen Strahlers im Wellenlängenbereich einer ganzen Bande konstant bleibt. Breitbandkorrelationen werden durch Integration von Schmalbandenmodellen gefunden und führen zu einfacheren mathematischen Gleichungen als bei den Schmalbandenmodellen. Beim „**Box Model**“ werden die Banden durch die jeweilige mittlere Wellenlänge, die mittlere Breite und den mittleren Strahlungsparameter (Absorptionskoeffizient, Intensität, etc.) beschrieben, wobei die Bestimmung der mittleren Breite nach Modest (2001) als sehr unsicher eingeschätzt wird.

Dem „**Exponential Wide Band Model**“ (EWBM) nach Edwards u. Balakrishnan (1973) liegt die Erkenntnis zugrunde, dass die Maxima der Strahlungsparameter zum Bandenende exponentiell abnehmen (siehe Abbildung 1.2) und die gesamte Bande somit durch exponentielle Funktionen für die untere Grenze, den symmetrischen Mittelteil und die obere Grenze der Bande beschrieben werden kann.

Für die Breitbandenmodelle wurden ebenfalls k -Verteilungsmodelle entwickelt, denen die gleichen Überlegungen wie den k -Verteilungsmodellen der Schmalbandenmodelle zugrunde liegen und die den Absorptionskoeffizienten für die Bande berechnen.

Globalmodelle In den bisher beschriebenen Spektralmodellen muss eine große Anzahl von Strahlungstransportgleichungen aufgestellt und gelöst werden. Eine iterative Lösung der Strahlungstransportgleichungen ist selbst bei konstantem Temperaturfeld nötig, da die einzelnen Strahlungstransportgleichungen miteinander gekoppelt sind. So kann zum Beispiel die wieder-emittierte Strahlung in einem anderen Wellenlängenbereich liegen und so deren Strahlungsintensität beeinflussen.

Da für die Kopplung mit der Energietransportgleichung der integrale (über die Wellenlängen) Strahlungswärmestrom und dessen Divergenz benötigt werden, wurden globale Spektralmodelle entwickelt, die das gesamte Spektrum beschreiben und die aufwändige Integration über die Wellenlängen vereinfachen. Das Medium wird im einfachsten Fall als grau angenommen, also eine einzige Strahlungstransportgleichung aufgestellt und gelöst und der totale Absorptionskoeffizient für diese Gleichung berechnet.

Das fortgeschrittenste, in den kommerziellen Strömungslösern verfügbare, Spektralmodell ist das Modell der gewichteten Summen grauer Strahler („**Weighted-Sum-of-Gray-Gases**“, WSGG). Bei diesem wird das teilnehmende Gas in eine Anzahl grauer Gase zerlegt, welche

mit einer temperaturabhängigen Wichtungsfunktion miteinander gekoppelt sind. Dadurch wird die Wellenlängenintegration zu einer Addition der einzelnen Strahlungsintensitäten vereinfacht. Es ist wichtig anzumerken, dass zwei verschiedene Möglichkeiten der Implementierung dieses Modells existieren. Die eine, wie in ANSYS FLUENT genutzt, löst nur eine Strahlungstransportgleichung und berechnet unter Nutzung einer mittleren Weglänge (entweder Zellvolumen oder globale Feuerraumdimension) aus den einzelnen grauen Gasen einen globalen Absorptionskoeffizienten. Diese Implementierung kann somit als „grau“ und „global“ im klassischen Sinne bezeichnet werden. Bei der Implementierung in ANSYS CFX (basierend auf Modest (1991)) hingegen wird für jedes graue Gas eine Strahlungstransportgleichung aufgestellt und gelöst, was die Berechnung eines mittleren Absorptionskoeffizienten unnötig macht und die Genauigkeit erhöht. In diesem Sinne ist es „global“ für jedes einzelne der grauen Gase, kann aber insgesamt als „nicht-graues“ Modell bezeichnet werden. Eine klare Unterscheidung und Einordnung dieser beiden unterschiedlichen Implementierungen für das gleiche Spektralmodell wurde in der Literatur nicht gefunden. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Implementierung von ANSYS CFX verwendet, die im Abschnitt 3.2.8 ausführlich beschrieben wird.

Eine verbesserte Variante des WSGG-Modells ist die Methode „*Spectral Line-Based Weighted-Sum-of-Gray-Gases*“ (SLW), die in Denison u. Webb (1993) und Denison u. Webb (1995) vorgestellt und beschrieben wird. Das „*Absorption Distribution Function*“ (ADF) Modell nach Pierrot et al. (1999) kann ebenfalls als weitere, verbesserte Variante der WSGG-Modelle angesehen werden. Neuere Veröffentlichungen passen die schon von den Schmal- und Breitbandmodellen bekannten k -Verteilungsmodelle auf die globalen Methoden an. Diese „*Full Spectrum k -Distribution*“ (FSK)-Methoden werden in Modest u. Zhang (2002) vorgestellt, sind aber in den kommerziellen Strömungslösern noch nicht implementiert.

1.4.6 Zusammenfassung

In Tabelle 1.1 sind ausgewählte Arbeiten dargestellt, die sich mit der CFD-Simulation mit Lösung der Massen- und Impulsbilanzgleichungen von technischen Anlagen mit festen Brennstoffen beschäftigen. Sie nutzen ein breites Spektrum der verschiedenen, bisher vorgestellten Modelle. Die große Zahl von Detailmodellen, die sich nur einem Teilaspekt widmen (zum Beispiel Bettmodelle, Modelle für den Partikelabbrand), werden nicht aufgezählt.

Tabelle 1.1: Zusammenfassung der CFD-Simulationen der Verbrennung fester Brennstoffe

Quelle	Beschreibung	Phasen- und Transportmodell	Reaktionskinetikmodell	Strahlungs- und (Spektralmodell)
Álvarez et al. (2011)	Flugstaubreaktor	Partikel	Gleichgewicht, Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (Gasphasenreaktion), finite Rate (Partikelabbrand)	discrete ordinate, (weighted sum of gray gas)
Baillifard et al. (2008)	Holzgasbrenner	Randbedingung	finite Rate	k.A.

Quelle	Beschreibung	Phasen- und Transportmodell	Reaktionskinetikmodell	Strahlungs- und (Spektralmodell)
Klasen u. Görner (1998)	Müllverbrennungsanlage	Randbedingung	Eddy-Break-Up	spherical harmonics, (k.A.)
T. Klason et al. (2008)	Holzpelletbrenner	Randbedingung	Advanced-Eddy-Dissipation	optically thin, spherical harmonics, discrete ordinate, (exponential wide band, global)
Klason u. Bai (2007)	Holzpelletbrenner	Randbedingung	Advanced-Eddy-Dissipation, finite Rate (NO _x)	spherical harmonics, (exponential wide band)
Menghini et al. (2007), Menghini et al. (2008)	Kaminofen	Randbedingung	keine Verbrennung, nur thermische Energiezufuhr	discrete ordinate, (k.A.)
Miltner et al. (2007)	Verbrennung von Biomasseballen	poröser Körper	unendl. schnell	discrete transfer, (k.A.)
Porteiro et al. (2009)	Holzpelletbrenner mit Warmwasserbereitung	Randbedingung	Advanced Eddy-Dissipation-Modell	discrete ordinate, (weighted sum of gray gas)
Scharler et al. (2011)	Kaminofen	Randbedingung	Eddy-Dissipation, finite-rate (NO _x)	discrete ordinate, (k.A.)
Schneider (2003)	Festbettvergaser	poröser Körper	finite Rate	keine Strahlung
Tabet et al. (2010)	Kaminofen	poröser Körper	vereinfachter Reaktionsmechanismus	discrete ordinate, (wide band cumulative k-distribution)
Wolf (2005)	Abfallverbrennung auf Rostsystem	poröser Körper	finite Rate	optically thin

In einigen der Arbeiten erfolgte keine Angabe des Spektralmodells für die thermische Strahlung, so dass keine Einordnung in dieser Modellkategorie erfolgen konnte.

1.5 Einordnung und Inhalt der Arbeit

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zwei kommerziell verfügbare Kaminöfen mit Keramikfilter theoretisch und experimentell untersucht. Gegenstand dieser Untersuchungen war die Frage, wie die Filter die inneren physikalischen Vorgänge im Kaminofen beeinflussen und wie die Heizleistung gesteigert sowie die Schadstoffemissionen verringert werden können. Die Experimente wurden mit dem Hintergrund durchgeführt, eine Basis für die Validierung der numerischen Simulationen zu schaffen und grundlegende Erkenntnisse über den zeitlichen Abbrand von Holzscheiten in Kaminöfen zu gewinnen und darzustellen.

Anhand der wurde die Makrokinetik des Abbrands von Holzscheiten untersucht und eine Methode zur Bestimmung der Abbrandkinetik entwickelt, die auf Online-Messungen der Massenabnahme des Holzes sowie Offline-Messungen der Masse und Zusammensetzung von Holzscheiten basiert. Für die Kaminöfen wird eine Gleichung zur Bestimmung der Masse und Elementarzusammensetzung in Abhängigkeit von der Zeit angegeben.

Bei der numerischen Simulation der Kaminöfen fand die detailgetreue Wiedergabe der Geometrie und somit der strömungstechnischen Gegebenheiten besondere Beachtung. Die numerische Simulation sollte eine Grundlage für die spätere Modellierung weiterer physikalischer Vorgänge wie beispielsweise Staubentstehung und -transport und Rußreaktionen im Filter darstellen. Aus diesem Grund wurde eine Top-Down-Strategie verfolgt, bei der möglichst viele physikalische Phänomene berücksichtigt und in immer detaillierteren Ansätzen genutzt werden. Einige Modellierungsansätze mussten allerdings von Anfang an verworfen werden, zum Beispiel konnten aufgrund der komplexen Geometrie keine instationären Berechnungen durchgeführt werden. Feststoffreaktionen und Abbrandmodelle, die zeitlich wandernde Reaktionsfronten hervorrufen, konnten somit nicht realisiert werden. Stattdessen wurde der stationäre Betriebsfall repräsentiert und bei den numerischen Simulationen in den Festkörpern nur das stationäre Temperaturfeld berechnet. Der Abbrand wurde über einen zeitlich konstanten Brennstoffzustrom an den Holzscheitoberflächen realisiert.

Zur Abschätzung der Stoff- und Energieströme wurde ein einfaches Verbrennungsmodell der Kaminöfen erstellt, auf dessen Basis die numerischen Simulationen aufbauen. Das Open-Source-Programmpaket CANTERA sowie die kommerzielle Software ANSYS CFX wurden zur Berechnung von eindimensionalen, isothermen Flammen mit detaillierten Reaktionsmechanismen angepasst und genutzt, um Gasphasenreaktionen genauer zu untersuchen.

In den numerischen Simulationen wird die thermische Strahlung unter Berücksichtigung der teilnehmenden Gase mit dem *Discrete Transfer Model* simuliert und ein Globalmodell für die Beschreibung der Spektren nach dem *Weighted-Sum-of-Gray-Gases* Spektralmodell unter Berücksichtigung des Rußanteiles verwendet. Das Rußmodell basiert auf den Arbeiten von Tesner et al. (1971), Magnussen u. Hjertager (1976) sowie Magnussen (2005). Die Transport- und Reaktionsprozesse der chemischen Spezies wurden mittels Transportgleichungen der Massenanteile realisiert, wobei die turbulenten Einflüsse vernachlässigt wurden. Die Bildung und der Transport von Stickoxiden wurden vernachlässigt. Der Filter wurde als poröser Körper mit geschwindigkeitsabhängigen Quellen- und Senkentermen in der Impulsbilanz modelliert.

Der Einfluss der Modelle für Turbulenz, den Absorptionskoeffizienten und die Reaktionskinetik auf die Ergebnisse der numerischen Simulation wurde durch Nutzung verschiedener Ansätze herausgearbeitet und umfassend dargestellt.

Die numerische Simulation erfolgte komplett innerhalb der ANSYS CFX-Umgebung unter Nutzung der CFX-eigenen Programmiersprache und ohne externe Softwarebibliotheken (weder selbst entwickelte noch frei verfügbare). Der Vorteil dieser Vorgehensweise liegt in der transparenteren Implementierung der Modelle im Vergleich zu externen Softwarebibliotheken, die meist nicht veröffentlicht werden.

2 Experimenteller Teil

2.1 Vorbemerkungen

Die Bilanzierung der Stoff- und Energieströme wurde auf der Basis von Messdaten durchgeführt und erlaubt Aussagen über den Messfehler dieser Bilanzen. Zu diesem Zweck wurden am Abgasstutzen (siehe Abbildung 2.1) unmittelbar am oberen Ende des Kaminofens die Gaszusammensetzung der Hauptabgaskomponenten CO , CO_2 , O_2 , H_2O sowie die Temperatur bestimmt. Darüber hinaus wurde die Massenabnahme des Brennstoffes (und damit indirekt der Brennstoffmassenstrom) mit zwei unterschiedlichen Methoden (Online und Offline) abgeschätzt.

Alle experimentellen Arbeiten wurden an zwei Kaminöfen durchgeführt (nachfolgend als „K 1“ und „K 2“ bezeichnet), deren Aufbau in Abbildung 2.1 abgebildet ist und deren Nennbrennstoffleistung bei 9 kW lag. Obwohl beide Kaminöfen sowohl mit Holz als auch Kohle als Brennstoff betrieben werden können, kam im Rahmen dieser Arbeit ausschließlich Holz zum Einsatz. Laut Herstellerangaben ist im Holzbetrieb eine Luftzufuhr durch den Rost (Primärluft) nicht nötig, weshalb bei allen Experimenten der Rost mit einer Ascheschicht abgedeckt und nahezu luftdicht ist. Die gesamte Verbrennungsluft wird somit als Scheibenspülluft und Sekundärluft dem Feuerraum zugeführt.

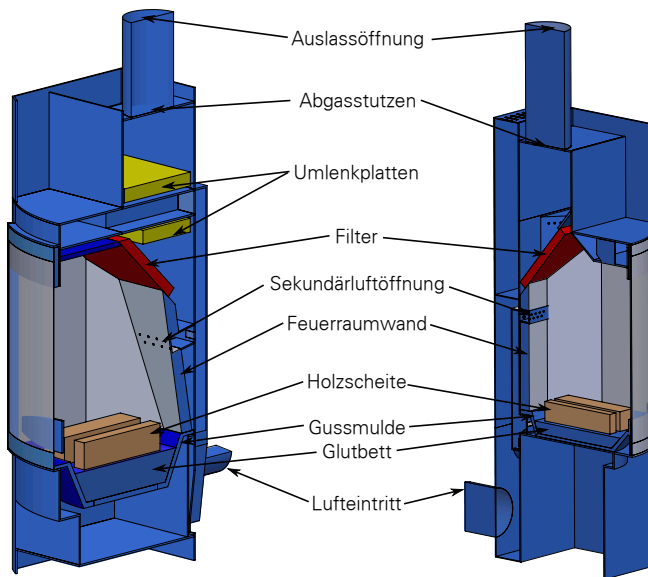


Abbildung 2.1: Aufbau der beiden untersuchten Kaminöfen (links „K 1“, rechts „K 2“)

Die durchschnittliche Auflagenmasse (Masse an Brennstoff, die am Anfang einer Abbrandperiode aufgelegt wird) betrug bei allen nachfolgend beschriebenen Messungen 1,53 kg (± 10 g). Die sich einstellenden Abbrandzeiten lagen bei ca. 45 Minuten (± 5 Minuten), wobei eine Periode als beendet galt, wenn die Flamme erloschen und der Kohlendioxidanteil unter 6 Vol – % gefallen war.

Die gesamte äußere Verkleidung (Schamott, Speckstein) wurde zur Vereinfachung entfernt und nur der reine Kamineinsatz, frei im Raum stehend, untersucht. Der Wassermassenanteil einer Brennstoffcharge konnte nur anhand von stichprobenartig genommenen Holzscheiten nach einigen Tagen ermittelt werden. Eine Einstellung eines gewünschten Wassermassenanteils war nicht möglich. Aus diesem Grund konnte der genaue Wassermassenanteil des Brennholzes erst nach den Abbrandversuchen durch die Laboranalyse zugeordnet werden.

Versuchsweise wurde die transparente Glasscheibe von innen mit Aluminium-Folie abgeklebt, um die thermische Strahlung durch die Scheibe zu verhindern und die dadurch verursachte Veränderung der Heizleistung zu untersuchen. Unter diesen Messbedingungen ergaben sich die in Tabelle 2.1 dargestellten fünf Messungen.

Tabelle 2.1: Charakterisierung der Messungen

Bezeichnung	Beschreibung
K 1 (10% H ₂ O)	Geometrie von „K 1“, Wassermassenanteil Holz = 10%
K 1 (10% H ₂ O, abgeklebt)	Geometrie von „K 1“, Wassermassenanteil Holz = 10%, Glasscheibe in der Tür innen mit Alufolie abgeklebt
K 1 (13% H ₂ O)	Geometrie von „K 1“, Wassermassenanteil Holz = 13%
K 2 (13% H ₂ O)	Geometrie von „K 2“, Wassermassenanteil Holz = 13%
K 2 (17% H ₂ O)	Geometrie von „K 2“, Wassermassenanteil Holz = 17%

Ein Messzyklus bestand immer aus einer Reihe von mehreren Messperioden, welche hintereinander bei ansonsten konstanten Einstellungen abliefen.

2.2 Charakterisierung des Brennstoffes

Das verwendete Holzmaterial wurde mehrmals hinsichtlich seiner Elementarzusammensetzung und des Heizwertes analysiert (Messung Nr. 1, 2 und 3 in Tabelle 2.2). Zusätzlich wurde während jeder Messung der Wassermassenanteil bestimmt. Bei einigen Messungen kam Holz mit einem Wasseranteil von 10 Massenprozent zum Einsatz, für das keine Elementaranalyse durchgeführt werden konnte. Für dieses Holz wurden Pseudo-Messwerte aus der mittleren Elementaranalyse der Messungen 2 und 3 zusammen mit einem Wassermassenanteil von 10 % berechnet (Messung Nr. 4 in Tabelle 2.2).

Tabelle 2.2: Heizwerte und Elementarzusammensetzungen (Massenanteile, asche- und schwefelfrei) des verwendeten Holzes

	Messung Nr.			
	1	2	3	4
Heizwert in MJ/kg	16,85	15,49	14,69	16,29
C	0,4591	0,4334	0,4073	0,4470
H	0,0518	0,0535	0,0518	0,0560
O	0,3401	0,3786	0,3651	0,3956
N	0,0050	0,0008	0,0010	0,0009
H ₂ O	0,1440	0,1337	0,1749	0,1004

2.3 Messung der Gaszusammensetzung

Die Gasmessungen CO, CO₂, O₂ wurden mit drei parallel angeschlossenen Gasmesssystemen durchgeführt (siehe Tabelle 2.3), so dass für diese Verbindungen mindestens zwei unterschiedliche Messwerte vorhanden waren.

Tabelle 2.3: Verwendete Messsysteme für die Gasanalyse

Bezeichnung des Messsystems (Typ, Messprinzip)	Messgröße und Messbereich
„IBP“ (Sick Maihak S710, nichtdispersiv Infrarot - NDIR)	CO 0 ... 1 Vol-% CO ₂ 0 ... 20 Vol-%
„TUD“ (EHEIM VISIT 01, elektrochemisch)	CO 0 ... 0,1 Vol-% (Sensor 1) CO 0 ... 1 Vol-% (Sensor 2) O ₂ 0 ... 21 Vol-%
„HSZG“ (EHEIM VISIT 03, elektrochemisch (O ₂), Infrarot (CO, CO ₂))	CO 0 ... 30 Vol-% CO ₂ 0 ... 30 Vol-% O ₂ 0 ... 21 Vol-%

Zusätzlich kam bei einigen Messungen ein Feuchtemessgerät Hygrophil® H 4230-10 der Firma Bartec zum Einsatz, mit welchem der Wasseranteil im Abgas gemessen werden konnte.

2.4 Temperaturmessungen

Alle Temperaturmessstellen waren mit Temperatursensoren vom Typ K (Messbereich $-220\text{ }^{\circ}\text{C} \dots +1150\text{ }^{\circ}\text{C}$) bestückt. Die Temperaturen auf der Außenoberfläche wurden an jeweils 12 verschiedenen Punkten aufgezeichnet, deren Positionen in Abbildung 2.2 und Abbildung 2.3 dargestellt sind. Die Abgastemperatur wurde ca. 50 mm oberhalb der Auslassöffnung erfasst.

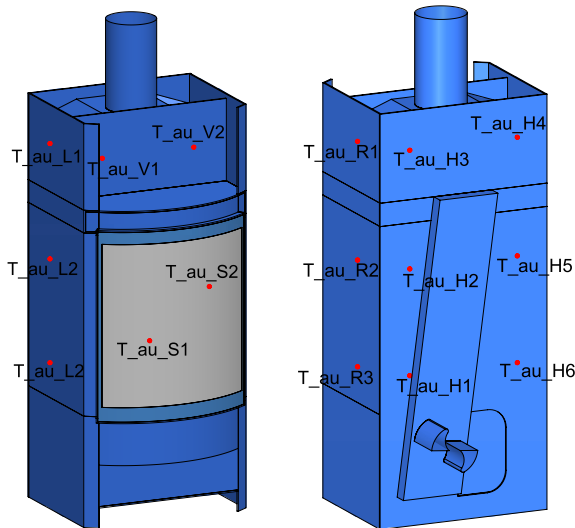


Abbildung 2.2: Temperaturmessstellen an Außenoberflächen des Kaminofens „K 1“

Der Feuerraum wurde ebenfalls mit mehreren Temperaturmessstellen, wie in Abbildung 2.4 gezeigt, versehen. Spiegelsymmetrisch zu den fünf Messstellen im Feuerraum auf der linken Seite ($T_{FR_L1} \dots T_{FR_L5}$) befinden sich auf der rechten Seite fünf Messstellen ($T_{FR_R1} \dots T_{FR_R5}$), die nicht dargestellt wurden. Ebenfalls nicht abgebildet sind vier Temperaturmessstellen auf der Filteroberseite ($T_{Fi_o1} \dots T_{Fi_o4}$), welche sich gegenüber den vier Messstellen ($T_{Fi_u1} \dots T_{Fi_u4}$) befinden.

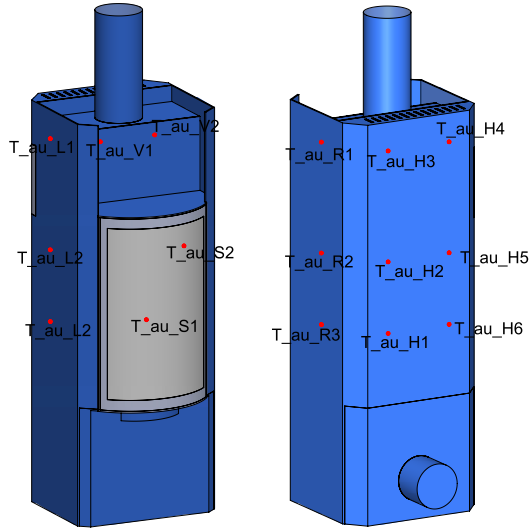


Abbildung 2.3: Temperaturmessstellen an Außenoberflächen des Kaminofens „K 2“

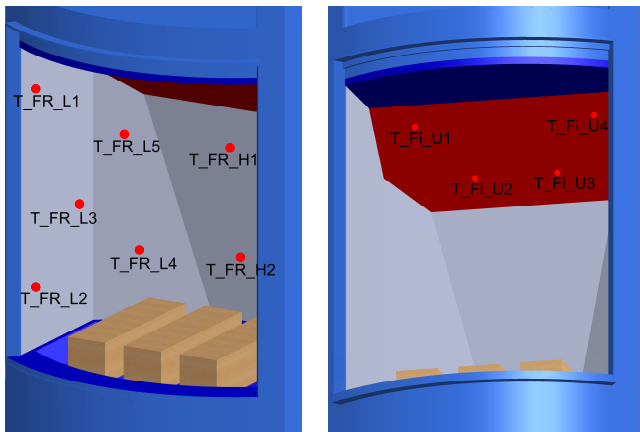


Abbildung 2.4: Feuerraum- und Filtertemperaturmessstellen des Kaminofens „K 1“

Der Kaminofen „K 2“ ist auf die gleiche Art und Weise mit Messstellen ausgestattet worden.

2.5 Messung des Verlaufes der Brennstoffmasse

2.5.1 Online-Messung der Massenabnahme des Brennstoffes

Der gesamte Kaminofenversuchsstand „K 1“ wurde zu Testzwecken auf eine Industriegewichte vom Typ VE 2000/316/1 der Firma Bizerba (Messgenauigkeit: 20 g) montiert. Dies ermöglichte somit eine kontinuierliche Bestimmung der Masse während der Messungen. Diese Messreihen konnten aber nicht parallel zu den anderen Messungen durchgeführt werden, d.h. die Massenabnahme kann nicht den exakten Abgasmessungen zugeordnet werden. Unter den Prüfbedingungen wurden beide Kaminöfen mit der gleichen Holzaufgabe (ca. 1,5 kg, Wassermassenanteil 10 % -13 %) und der gleichen Periodendauer (ca. 45 Minuten) betrieben, so dass davon ausgegangen werden kann, dass sich die Massenabnahmen ebenfalls annähernd gleichen und die ermittelten Massenabnahmen auch für den Kaminofen „K 2“ gelten.

2.5.2 Offline-Messung der Massenabnahme des Brennstoffes

Zur Überprüfung der Modelle zur Massenabnahme wurden für beide Kaminöfen die Massen der Holzscheite nach bestimmten Zeiten ermittelt (10, 20, 30, 40, 50 Minuten). Der Vorteil dieser Methode liegt darin, dass neben der Masse auch die Zusammensetzung ermittelt werden kann. Nachteilig ist, dass der Abbrand dabei unterbrochen werden muss und zum Ende einer Abbrandperiode die Entnahme der ursprünglichen Auflage mit größeren Fehlern verbunden ist, da die Holzscheite sehr leicht zerfallen.



Abbildung 2.5: Darstellung der Holzentnahme (links oben: Scheitentnahme aus Ofen, rechts oben: Zugabe von Stickstoff, links unten: Scheitentnahme aus Abkühlbehälter, rechts unten: abgekühlter Scheit auf Waage)

Die größte Herausforderung bei dieser Herangehensweise bestand darin, das Holz so schnell wie möglich abzukühlen und den Abbrandprozess damit zu stoppen, ohne dabei die Elementarzusammensetzung (und den Wassermassenanteil) wesentlich zu beeinflussen. Um dieses Ziel zu erreichen, wurden die Holzscheite sofort nach Entnahme in einen Behälter mit flüssigem Stickstoff gelegt und waren nach ca. 1-2 Minuten (je nach Scheitgröße) auf Zimmertemperatur abgekühlt.

Zwischen den Abbrandperioden mit Massenentnahme wurde ein kompletter Abbrand unter den normalen Bedingungen durchgeführt, d.h. eine Abbranddauer von 40-50 Minuten realisiert. Abweichend davon wurde die letzte Abbrandperiode des Messzyklus 50 Minuten laufen gelassen. Die Messung mit Massenentnahme wurde zweimal durchgeführt, d.h., es existieren Messdaten für zwei Messzyklen bestehend aus jeweils mindestens neun Abbrandperioden. In Abbildung 2.5 ist die Vorgehensweise der Massenentnahme und der Abkühlung mit flüssigem Stickstoff bildhaft dargestellt.

Mittels einer Waage wurde beobachtet, wie der im Stickstoffbad aufgenommene Stickstoff langsam verdampfte und sich die Holzmasse verringerte. Es kann angenommen werden, dass der Messfehler durch Veränderung der Holzzusammensetzung aufgrund einer eventuellen Einbindung zusätzlichen Stickstoffes oder anderer physikalischer Effekte gering ist gegenüber dem Messfehler durch die Abkühlzeit.

3 Mathematische Modellierung

3.1 Voruntersuchungen zur Evaluierung der Modelle und Randbedingungen

3.1.1 Verbrennungsrechnungen

Für Verbrennungsrechnungen existiert eine Vielzahl von Fachbüchern, wie beispielsweise Effenberger (1999) und Vorschriften, zum Beispiel DIN EN 13240. Anhand dieser können Kaminöfen und ganz allgemein Feuerstätten ausgelegt und berechnet werden. Zur überschlägigen Berechnung im Vorfeld der numerischen Simulation und zum Vergleich mit dieser wurde in Anlehnung an die Fachliteratur ein Modell einer einfachen Verbrennungsrechnung erstellt und mittels Tabellenkalkulation realisiert. Basierend auf dem in Abbildung 3.1 skizzierten Schema werden alle Zustandsgrößen des Kaminofens an einem Punkt konzentriert und die Massen- und Energiebilanz

$$\begin{aligned} \text{Masse:} \quad \dot{m}_{\text{Abgas}} &= \dot{m}_{\text{Brennstoff}} + \dot{m}_{\text{Luft}} \\ \text{Energie:} \quad \dot{E}_{\text{Wärme}} &= \dot{E}_{\text{Brennstoff}} + \dot{E}_{\text{Luft}} - \dot{E}_{\text{Abgas}} \end{aligned} \quad (3.1)$$

aufgestellt. Im Unterschied zur numerischen Simulation werden die Bilanzgleichungen hier in Form einer „Black-Box“-Betrachtung angewandt.

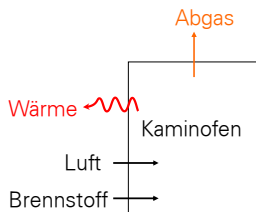


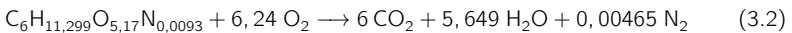
Abbildung 3.1: Skizze zur einfachen Verbrennungsrechnung

Folgende Annahmen wurden für die vereinfachte Verbrennungsrechnung getroffen:

- stationäre Betriebsweise
 - konstanter Holzmassenstrom
 - konstante Holzzusammensetzung
 - konstantes Luftverhältnis
- Vernachlässigung des Reststoffes (Asche und unverbrannte Kohlenwasserstoffe)
- Vernachlässigung der Luftfeuchte in der Verbrennungsluft

- vollständig ablaufende Oxidation des gesamten Brennstoff-Kohlenstoffes zu Kohlendioxid
- Abgastemperatur entspricht der mittleren Feuerraumtemperatur
- einheitliche Temperatur der Außenoberfläche
- einheitlicher Wärmeübergangskoeffizient α_{au} der Außenoberfläche
- Schamottschicht hat mittlere Dicke um gesamten Feuerraum
- Umgebungstemperatur $\vartheta_U = 20^\circ\text{C}$
- Außenoberfläche des Kaminofens ist sehr klein im Vergleich zur Oberfläche der umgebenden Wände

Der Brennstoff Holz entspricht in seiner Zusammensetzung den Werten der Messung Nr. 2 nach Tabelle 2.2. Aus der Elementarzusammensetzung ergibt sich bei Festlegung von 6 C-Atomen im Molekül die Verbindung $\text{C}_6\text{H}_{11,299}\text{O}_{5,17}\text{N}_{0,0093}$ mit einer Molmasse von $M_{\text{C}_6\text{H}_{11,299}\text{O}_{5,17}\text{N}_{0,0093}} = 166 \text{ kg/kmol}$. Das im Brennstoff enthaltene Wasser wurde auf die Elemente H und O aufgeteilt. Aus der vollständigen Reaktion mit Sauerstoff nach der Reaktionsgleichung



wurde unter Verwendung des Heizwertes für Holz (feucht, Wasseranteil 13%) von $\bar{H}_{f,\text{Holz}} = 15,5 \text{ MJ/kg}$ und den Standardbildungsenthalpien von $\Delta \bar{h}_{f,\text{O}_2}^0 = 0 \text{ kJ/kmol}$, $\Delta \bar{h}_{f,\text{N}_2}^0 = 0 \text{ kJ/kmol}$, $\Delta \bar{h}_{f,\text{CO}_2}^0 = -3,95 \text{ e5 kJ/kmol}$ und $\Delta \bar{h}_{f,\text{H}_2\text{O}}^0 = -2,418 \text{ e5 kJ/kmol}$ die Standardenthalpie des Brennstoffes zu $\Delta \bar{h}_{f,\text{C}_6\text{H}_{11,299}\text{O}_{5,17}\text{N}_{0,0093}} = -1,149 \text{ e6 kJ/kmol}$ beziehungsweise $\Delta h_{f,\text{C}_6\text{H}_{11,299}\text{O}_{5,17}\text{N}_{0,0093}} = -6,909 \text{ e3 kJ/kg}$ berechnet.

Die Enthalpieströme der eintretenden Luft und des Abgases wurden durch die Korrelationen im Anhang A.7 zusammen mit den gemessenen Massenströmen nach Anhang A.4 und A.5 berechnet. Aufgrund der Annahme von konzentrierten Bilanzgrößen existiert im gesamten Feuerraum eine einheitliche Temperatur, die auch gleich der Abgastemperatur ist. In der Literatur basiert die Abgastemperatur häufig auf Messdaten, wodurch die Heizleistung direkt berechnet werden kann. Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte einfache Verbrennungsmodell nutzt einen anderen Ansatz und errechnet die Abgastemperatur beziehungsweise Feuerraumtemperatur durch die Berechnung des Wärmestromes über die Außenoberfläche des Kaminofens. Der dafür benötigte iterative Berechnungsalgorithmus ist in Abbildung 3.2 dargestellt.

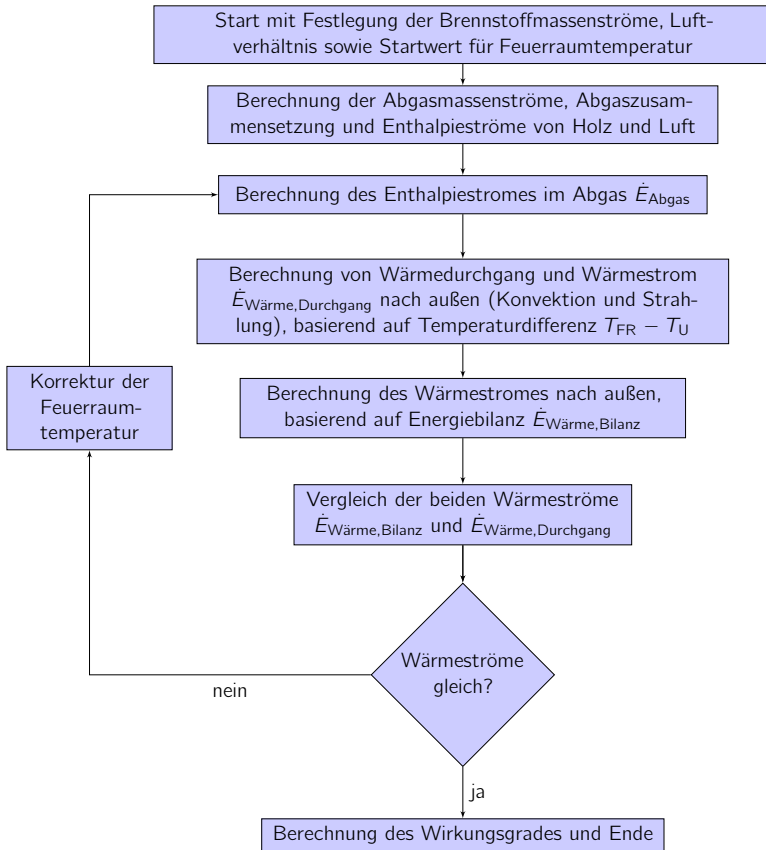


Abbildung 3.2: Ablaufplan der einfachen Verbrennungsrechnung

Die wichtigsten Gleichungen und Zusammenhänge zur Berechnung der einzelnen Größen sind im Anhang A dargestellt und dort zum besseren Verständnis hergeleitet.

Die dargestellten Vereinfachungen stellen grobe Näherungen dar und können bei Bedarf verbessert beziehungsweise erweitert werden. So sind beispielsweise in Effenberger (1999) detaillierte Berechnungen des inneren Wärmeüberganges und der Strahlungsvorgänge aufgeführt. Darüber hinaus sind sicherlich auch Modelle für die komplexen chemischen Reaktionen implementierbar. Auf eine Implementierung besserer Modelle in das einfache Verbrennungsmodell wurde verzichtet, da die meisten der Verbesserungen eine Erhöhung des räumlichen Detaillierungsgrades nach sich ziehen. Für eine Validierung der numerischen Simulation ist die einfache Verbrennungsrechnung ausreichend.

3.1.2 Verbrennungskinetik, Reaktionsmechanismus und Ersatzbrennstoff

Die in Abschnitt 1.4.3 angegebenen Literaturstellen für Reaktionsmechanismen und Gleichungen zur Beschreibung der Mikro- und Makrokinetik der Reaktionen wurden hinsichtlich ihrer Eignung in numerischen Strömungssimulationen untersucht. Die Analyse ergab, dass die Modellierung des festen Brennstoffes (und damit Berücksichtigung der Vergasungsreaktionen) bei Brennstoffpartikeln größer 20 mm-50 mm nur durch instationäre Berechnungen möglich ist. Nur so kann die zeitliche und örtliche Verteilung der Brennstoffzusammensetzung und Temperatur berücksichtigt werden. Die instationäre Berechnung führt aber zu einem deutlich vergrößerten Rechenaufwand, wodurch die Simulation eines kompletten Kaminofens äußerst schwierig wird.

Darüber hinaus ist die Datenlage bezüglich der Kinetik der Feststoffreaktionen bei biogenen Brennstoffen unklar (siehe Schneider (2003) Seite 69) und die Recherche zuverlässiger Daten problematisch. Zur Umgehung dieser Schwierigkeit wurde in der vorliegenden Arbeit ein quasi-stationärer Ansatz verfolgt, bei dem von einer mittleren Brennstoffzusammensetzung bei konstanter Ausgangsgröße der Scheite ausgegangen wird.

Eine Komplikation bei der Nutzung dieses Ansatzes besteht darin, dass der gegebene Brennstoff (mit seinem gemessenen Heizwert) durch die Gase Methan, Kohlendioxid, Kohlenmonoxid, Wasserstoff und festen Kohlenstoff ersetzt wird. Die spezifischen Enthalpien dieser Stoffe sind festgelegt, weshalb durch Vorgabe der Brennstoffzusammensetzung indirekt der Heizwert des Brennstoffes auch definiert wird. Die Elementarzusammensetzung und der Heizwert des Gasgemisches stimmen daher nicht zwangsläufig mit den experimentell ermittelten Daten überein. Die Umwandlung des festen Brennstoffes muss demnach zwingend unter dem Gesichtspunkt der Elementarbilanz und Energiebilanz erfolgen, was gewisse Annahmen erfordert. Ohne diese Annahmen oder nur unter Berücksichtigung der Elementarbilanz ist das System bezüglich des Heizwertes überbestimmt und es wird unter Umständen ein falscher Heizwert impliziert, was zu einer fehlerhaften Gesamtbilanzierung führt und die numerische Simulation schlecht mit den Experimenten vergleichbar macht.

In der vorliegenden Arbeit wurde der feste Brennstoff Holz durch einen gasförmigen Ersatzbrennstoff (nachfolgend als „Ersatzgas“ bezeichnet) abgebildet. Dieses Ersatzgas weist die gleiche Elementarzusammensetzung und den gleichen Heizwert wie das eingesetzte Holz auf. Dabei sind prinzipiell zwei verschiedene Vorgehensweisen möglich. Zum einen kann der Ersatzbrennstoff aus einem **Gemisch idealer Gase** bestehen, zum anderen kann ein **künstliches Gas**, also ein nur theoretisch denkbare Gas mit selbst definierten Stoffeigenschaften, verwendet werden. Der Vorteil der Gemische idealer Gase ist, dass für die Gasphasenreaktionen vorhandene Reaktionsmechanismen aus der Literatur entnommen werden können. Nachteilig ist, dass unter Umständen keine zur Stöchiometrie und dem Heizwert passende Gaskombination gefunden werden kann.

Der Vorteil der künstlichen Gase liegt darin, dass keinerlei Beschränkungen bezüglich der elementaren Zusammensetzung und des Heizwertes (beziehungsweise der Enthalpie) existieren. Nachteilig hingegen sind fehlende Angaben zur Reaktionskinetik in der Fachliteratur, da das künstliche Gas nicht real existiert und daher dessen Kinetik nicht direkt experimentell bestimmbar ist.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden beide Vorgehensweisen zur Erstellung der Ersatzgase untersucht und die Resultate miteinander verglichen. Nachfolgend werden sie daher beide beschrieben und die so ermittelten Ersatzgase charakterisiert.

Für ein Gemisch idealer Gase wurden als Erstes geeignete, real existierende Gase ausgewählt und dann mit einem Lösungsverfahren deren Anteile so bestimmt, dass die Elementbilanz und der Heizwert des Gemisches mit denen vom Holz übereinstimmen. Als mögliche brennbare Gasbestandteile wurden dafür H_2 , CO , CH_4 , C_2H_6 sowie C_3H_8 ausgesucht. Für diese Auswahl waren verfügbare Stoffdaten in CANTERA (Goodwin (2003)) und ANSYS CFX sowie zur Verfügung stehende Reaktionsmechanismen für CANTERA ausschlaggebend. Die Erstellung dieses Ersatzgases erfolgte weiterhin unter dem Aspekt der möglichst geringen Zahl von Gasen, um die Anzahl der Transportvariablen, und damit den rechnerischen Aufwand, zu verringern. Aufgrund der typischen Verbrennungsreaktion werden in der nachfolgenden numerischen Simulation mindestens die Gasspezies O_2 , N_2 , H_2O , CO_2 benötigt, so dass diese ebenfalls zur Verfügung stehen. Der Sauerstoffanteil wurde null gesetzt, weil in den Simulationen Vormischflammen vermieden werden sollten, da diese die numerische Stabilität negativ beeinflussen können.

Nach Festlegung der möglichen Brennstoffe wurden Umsatzvariablen für jeden Brennstoff eingeführt, wodurch sich ein lineares Gleichungssystem mit Nebenbedingungen (Anteile größer oder gleich null) ergibt, dessen Koeffizienten mit Hilfe eines Gleichungslösers (Bestandteil der Software Microsoft EXCEL) bestimmt wurden. Unter Nutzung der Holzzusammensetzung nach Messung Nr. 2 in Tabelle 2.2 wurden durch schrittweises Reduzieren der verfügbaren Brennstoffe zwei Gasgemische „Ersatz1“ und „Ersatz2“ bestimmt, welche in Tabelle 3.1 charakterisiert werden.

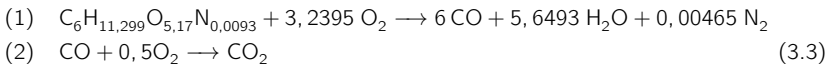
Der angegebene Heizwert von Holz und beiden Ersatzgasen beträgt so $H_i = 15,5 \frac{\text{MJ}}{\text{kg}}$. Da beide Ersatzgase die gleiche Elementbilanz aufweisen, besitzen sie auch den gleichen spezifischen Luftbedarf.

Neben diesen beiden Ersatzgasen wurde ein künstliches Ersatzgas $\text{C}_6\text{H}_{11,299}\text{O}_{5,17}\text{N}_{0,0093}$ erstellt (nachfolgend mit „Ersatz5“ bezeichnet), das der Elementarzusammensetzung und dem Heizwert des Holzes entspricht. Dieses Ersatzgas war Basis der vereinfachten Verbrennungsrechnung (siehe Gleichung (3.2) auf Seite 38).

Tabelle 3.1: Elementare Zusammensetzung des verwendeten Holzes (Wasser auf Elemente H und O verteilt) und der Ersatzbrennstoffe

Gasspezies	Stoffmengenanteile			Massenanteile		
	Holz	Ersatzgas 1	Ersatzgas 2	Holz	Ersatzgas 1	Ersatzgas 2
C	0,2669	0	0	0,4333	0	0
H	0,5026	0	0	0,0685	0	0
O	0,2300	0	0	0,4974	0	0
N	0,0004	0	0	0,0008	0	0
H ₂	0	0,1612	0	0	0,0090	0
N ₂	0	0,0010	0,0008	0	0,0008	0,0008
H ₂ O(g)	0	0,0458	0	0	0,0229	0
CO	0	0	0,1414	0	0	0,1338
CO ₂	0	0,5375	0,3894	0	0,6561	0,5790
CH ₄	0	0	0,3997	0	0	0,2166
C ₂ H ₆	0	0	0,0687	0	0	0,0698
C ₃ H ₈	0	0,2544	0	0	0,3112	0

Die Reaktionskinetik der Verbrennung der drei Ersatzgase „Ersatz1“, „Ersatz2“ und „Ersatz5“ wurde untersucht und die Ergebnisse wurden miteinander verglichen. Für die beiden Gemische idealer Gase („Ersatz1“ und „Ersatz2“ wurde der Reaktionsmechanismus von Jones u. Lindstedt (1988) ausgewählt (siehe Gleichungen (1.10) bis (1.25)) und als Referenz der detaillierte Mechanismus Gri-Mech nach Frenklach et al. (2000) mit 53 verschiedenen Spezies und 325 Reaktionen. Das künstliche Ersatzgas „Ersatz5“ wurde mit einem vereinfachten 2-Schritt-Mechanismus unter Vernachlässigung der Rückreaktion von CO₂ zu CO mit den Reaktionen



und einer durch Anpassung ermittelten Reaktionskinetik für den Abbau von C₆H_{11,299}O_{5,17}N_{0,0093} nach

$$\frac{dC_{\text{C}_6\text{H}_{11,299}\text{O}_{5,17}\text{N}_{0,0093}}}{dt} = -4 \cdot 10^{13} \frac{\text{m}^{9,7185}}{\text{kmol}^{3,2395} \cdot \text{s}} \cdot C_{\text{O}_2}^{3,2395} \tag{3.4}$$

berechnet. Basis der Anpassung war der Grundgedanke, dass der Brennstoff an der Scheitoberfläche und dem Glutbett schon nahezu vollständig zu CO reagiert hat und somit als unendlich schnell reagierend angesehen werden kann. In numerischen Untersuchungen wurde die Reaktionsgeschwindigkeit der ersten Reaktion daher schrittweise so weit erhöht, bis keine Änderungen an den zeitlichen Verläufen der Spezieskonzentrationen mehr auftraten. Die Reaktionskinetik kann somit als unabhängig von der Geschwindigkeit der ersten Reaktion angesehen

werden und wird nur durch die zweite Reaktion limitiert. Die Kinetik für die Reaktion von CO zu CO_2 wurde von Dryer u. Glassman (1973) (siehe Gleichung (1.4) und (1.5)) übernommen.

Zur Voruntersuchung bezüglich der Reaktionskinetik wurde eine nulldimensionale (d.h. nur zeitabhängige Variablen, keine Ortsabhängigkeit) Simulation durchgeführt. Ziel dieser Untersuchung ist eine Zeitskalenabschätzung der Reaktionen bei konstanter Temperatur, ohne Berücksichtigung des Spezies- und Energietransportes – es wird also nur die Mikrokinetik berücksichtigt. Das jeweilige Ersatzgas reagierte dabei vorgemischt mit Luft bei einem Luft-verhältnis von 2 unter isothermen Bedingungen bei einer Temperatur von 1100 K, was den Bedingungen in der Reaktionszone nahe kommt. Die Simulationen des Gri-Mech-Mechanismus und des 2-Schritt-Reaktionssystems wurden mit der Software CANTERA durchgeführt. Die Jones-Kinetik konnte aufgrund des Reaktionsansatzes mit negativen Reaktionsordnungen nur in Ansys CFX realisiert werden und unterliegt einer numerischen Genauigkeit von $1 \cdot 10^{-10}$ bei den Massenanteilen. In den Abbildungen 3.3 bis 3.6 ist der zeitliche Verlauf des Massenanteils der Spezies dargestellt.

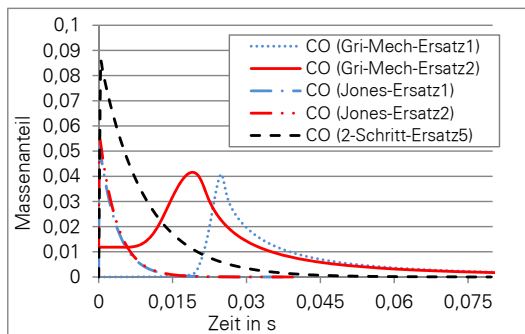


Abbildung 3.3: Zeitlicher Verlauf des Massenanteils Kohlenmonoxid für verschiedene Reaktionsmechanismen

Es ist erkennbar, dass bei Verwendung des Reaktionsmechanismus (Gri-Mech) das Kohlenmonoxid mit einer zeitlichen Verzögerung reagiert. Dieses Verhalten ist als Zündungsverzögerung bekannt und beispielsweise in Warnatz et al. (2006) beschrieben, kann aber mit den vereinfachten Mechanismen nach Jones oder dem 2-Schritt-Mechanismus nicht wiedergegeben werden. Die Massenanteile nähern sich nach einer Zeit von ca. 0,03 s alle an null an und erreichen schon nach einer Sekunde Werte von unter 1 ppm (siehe Tabelle 3.2). Darüber hinaus wird aus den Abbildungen deutlich, dass die Unterschiede von „Ersatz1“ und „Ersatz2“ bei der Verwendung der Kinetik nach Jones nahezu vernachlässigbar klein sind. Bei der Nutzung der Gri-Mech-Kinetik sind aber Unterschiede zwischen den beiden Ersatzgasen auf Basis von Gemischen idealer Gase vorhanden.

Tabelle 3.2: Berechnete Massenanteile Kohlenstoff zu zwei verschiedenen Zeitpunkten (Genauigkeit der Simulationen mit Jones-Kinetik limitiert auf $1 \cdot 10^{-10}$)

	t=0,08 s	t=1 s
CO (Gri-Mech-Ersatz1)	1,92E-03	3,84E-06
CO (Gri-Mech-Ersatz2)	1,74E-03	3,79E-06
CO (Jones-Ersatz1)	4,29E-08	$< 1 \cdot 10^{-10}$
CO (Jones-Ersatz2)	4,70E-08	$< 1 \cdot 10^{-10}$
CO (2-Schritt-Ersatz5)	1,75E-05	1,42E-08

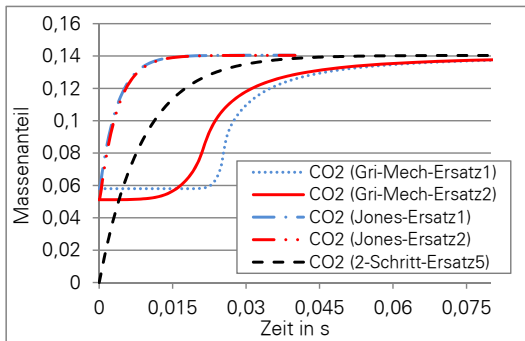


Abbildung 3.4: Zeitlicher Verlauf des Massenanteils Kohlendioxid für verschiedene Reaktionsmechanismen

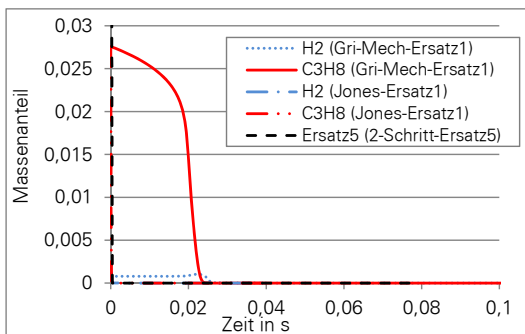


Abbildung 3.5: Zeitlicher Verlauf der Massenanteile Propan und Wasserstoff (beziehungsweise Ersatzgas „Ersatz5“ bei 2-Schritt-Ersatz5) für verschiedene Reaktionsmechanismen

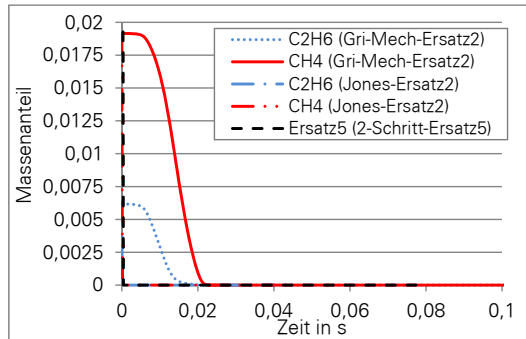


Abbildung 3.6: Zeitlicher Verlauf der Massenanteile Methan und Ethan (beziehungsweise Ersatzgas „Ersatz5“ bei 2-Schritt-Ersatz5) für verschiedene Reaktionsmechanismen

In einer weiteren Simulation wurde das Ersatzgas bei Vormischung mit Luft (bei einem Luftverhältnis von $\lambda_L = 2$) in einer eindimensionalen, isothermen Flammenberechnung verbrannt. Ziel dieser Untersuchung ist eine Zeitskalenabschätzung der Reaktionen bei konstanter Temperatur – also wie bei der ersten Simulation – diesmal aber unter Berücksichtigung des Spezies- und Energietransportes. In diesen Simulationen wird somit die Makrokinetik betrachtet, d.h. die Mikrokinetik der Reaktionen bei gleichzeitiger Betrachtung der konvektiven und diffusiven Ströme von Stoff und Energie.

Der Einlass weist dabei keinen Spezies- oder Temperaturgradient auf und ist somit frei von Rückdiffusion der Stoffe und ohne Energieabgabe. Ohne die gradientenfreie Formulierung reagieren die Spezies unmittelbar am Eintritt und würden die Temperatur erhöhen, was nur durch Energieabfuhr unterbunden werden kann. Darüber hinaus führen Diffusionsprozesse der Spezies zu einer Beeinflussung der Einlasskonzentrationen, was die Einlassgeschwindigkeit verändert und die gesamte Zeitskala verzerrt. Mit Hilfe dieser Simulationen ist es möglich, die maximale Eintrittsgeschwindigkeit zu ermitteln, bei der unter isothermen Bedingungen die Reaktionsgeschwindigkeit (unter Berücksichtigung der Diffusionsgeschwindigkeit) gleich der Strömungsgeschwindigkeit ist. Ab einer höheren Eintrittsgeschwindigkeit wird die Flamme „ausgeblasen“ und erlischt.

Die maximale Eintrittsgeschwindigkeit unter den gegebenen Bedingungen wurde unter Verwendung des Gri-Mech-Mechanismus mit ca. 0,1 m/s berechnet und für die restlichen Simulationen als Eintrittsgeschwindigkeit festgelegt. Simulationen dieser Art erfordern wesentlich mehr Rechenaufwand als die nulldimensionalen, da hierbei der diffusive Stofftransport der einzelnen Spezies mit berücksichtigt wird. Die gradientenfreie Randbedingung wurde mittels eines 2-Zonen-Ansatzes realisiert, bei dem das vorgemischte Gas erst durch eine Zone ohne Reaktionen geführt wird und ab einer gewissen Position die eigentliche Reaktionszone beginnt. Die Simulationen des Gri-Mech-Mechanismus und des 2-Schritt-Reaktionssystems wurden mit der Software CANTERA durchgeführt, die Jones-Kinetik konnte aufgrund des Reaktionsansatzes mit negativen Reaktionsordnungen nur in ANSYS CFX realisiert werden,

was zu einer größeren Rechendauer führte. Das Modell der miteinander gekoppelten, nicht-reagierenden und reagierenden Zone wurde in CANTERA durch eine Reihenschaltung von zwei eindimensionalen Flammenmodellen realisiert, bei der die erste Flammenberechnung mit einer zu null definierten Mikrokinetik ablief und an der Schnittstelle identische Gradienten festgelegt wurden. Programmiert wurde das Modell wie alle CANTERA-Berechnungen in der Programmiersprache Python.

In ANSYS CFX wurde mittels einer benutzerdefinierten Funktion in der nichtreagierenden Zone die Kinetik-Parameter zu null gesetzt. Die Funktion wurde in der ANSYS CFX-eigenen Programmiersprache CEL („CFX Expression Language“) implementiert.

Die Transportgrößen (Wärmeleitfähigkeiten und Diffusionskonstanten) wurden mittels der kinetischen Gastheorie berechnet, die in Abschnitt 3.2.3 beschrieben werden. In den Abbildungen 3.7 bis 3.10 ist der zeitliche Verlauf des Massenanteils der Spezies dargestellt. Der schattierte Bereich ist dabei die Zone ohne Reaktionen, ab der Längenposition 0 wurden die Reaktionen zugelassen. Die Veränderungen der Speziesmassenanteile in der Zone ohne Reaktion resultieren nur in der Rückdiffusion aus der Reaktionszone.

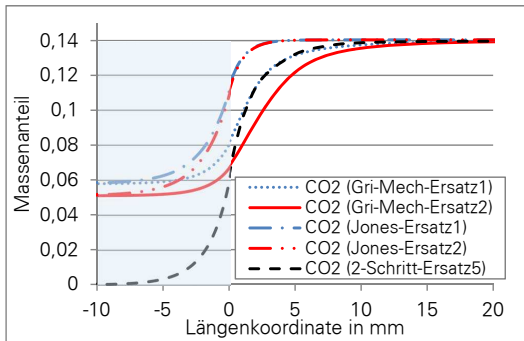


Abbildung 3.7: Örtlicher Verlauf des Massenanteils Kohlenmonoxid für verschiedene Reaktionsmechanismen

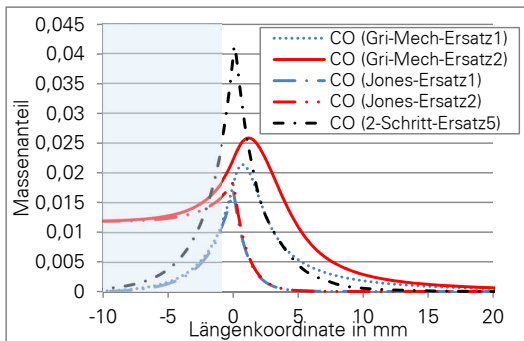


Abbildung 3.8: Örtlicher Verlauf des Massenanteils Kohlendioxid für verschiedene Reaktionsmechanismen

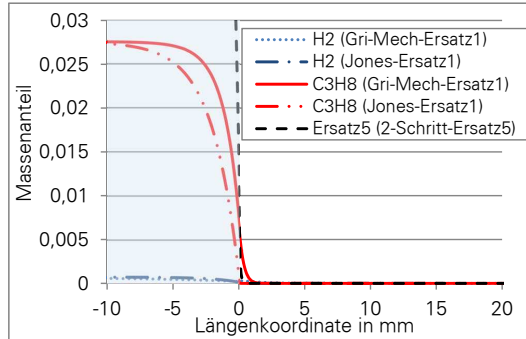


Abbildung 3.9: Örtlicher Verlauf der Massenanteile Propan und Wasserstoff (beziehungsweise Ersatz5 bei 2-Schritt-Ersatz5) für verschiedene Reaktionsmechanismen

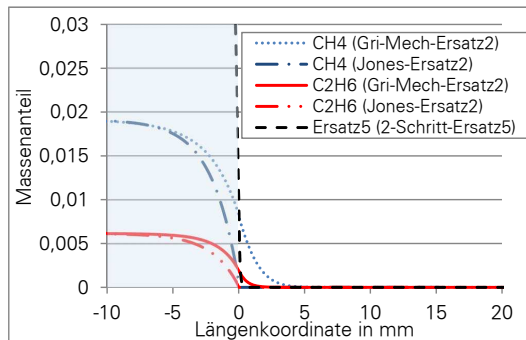


Abbildung 3.10: Örtlicher Verlauf der Massenanteile Methan und Ethan (beziehungsweise bei 2-Schritt-Ersatz5) für verschiedene Reaktionsmechanismen

In den Abbildungen 3.7 bis 3.10 wird deutlich, dass sich die Massenanteile nach einer Distanz von ca. 15 mm, was einer Zeitdauer von 0,15 s entspricht, angleichen. Die Unterschiede zwischen den beiden Ersatzgasen „Ersatz1“ und „Ersatz2“ mit der Reaktionskinetik nach Jones sind vernachlässigbar klein. Wie schon bei den nulldimensionalen Berechnungen zeigt sich, dass bei dieser niedrigen Temperatur CO nur als Zwischenprodukt auftritt und nach kurzer Zeit wieder abgebaut wird.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die 2-Schritt-Reaktionskinetik mit dem künstlichen Ersatzgas „Ersatz5“ besser die detaillierte Reaktionskinetik nach Gri-Mech wiedergibt als die Reaktionskinetik von Jones u. Lindstedt (1988). Darüber hinaus wird klar, dass bei den angenommenen Temperaturen von höchstens 1100 K die Rückreaktion von CO₂ zu CO somit vernachlässigbar ist und dass das im Abgas vorhandene CO daher wesentlich aus dem nich-

tumgesetzten Brennstoff resultiert. Die Unterschiede zwischen den Ersatzgasen „Ersatz1“ und „Ersatz2“ hängen stark vom verwendeten Reaktionsmechanismus ab, weshalb die Wahl zwischen diesen beiden Ersatzgasen mit Unsicherheiten verbunden ist. Der Gri-Mech-Mechanismus selbst ist aufgrund des Rechenaufwandes für numerische Simulationen von Kaminöfen nicht ohne weitere Vereinfachungen (zum Beispiel Mischungsanteilansatz mit Flamelet-Bibliotheken, Reduzierung durch Vernachlässigung nicht relevanter Spezies) nutzbar und ist darüber hinaus für reine Gasphasenreaktionen entwickelt worden, so dass nur Aussagen bezüglich der Genauigkeit für die Verbrennung gasförmiger Brennstoffe getroffen werden können. In dieser Hinsicht kann der Gri-Mech-Mechanismus sicherlich als der Mechanismus mit der größten Genauigkeit angesehen werden. Für feste Brennstoffe müssen aber auf jeden Fall noch die Gas-Feststoff-Reaktionen mit berücksichtigt werden.

Es wurde angenommen, dass die Unterschiede zwischen den Ersatzgasen und ihren homogenen Gasphasenreaktionen kleiner als die Unterschiede sind, die sich bei der Berücksichtigung der Gas-Feststoff-Reaktionen ergeben. Aus diesem Grund wurde entschieden, dass in der numerischen Simulation der einfache 2-Schritt-Mechanismus mit dem künstlichen Gas „Ersatz5“ verwendet werden kann, da dieser Reaktionsmechanismus wesentlich weniger Rechenaufwand erfordert und eine höhere numerische Stabilität aufweist als die Nutzung der Ersatzgase „Ersatz1“ oder „Ersatz2“ mit der Reaktionskinetik nach Jones u. Lindstedt (1988).

3.1.3 Bestimmung des äußeren Wärmeübergangskoeffizienten

Der Wärmeübergangskoeffizient der Außenoberflächen des Kaminofens wurde durch Strömungssimulationen mit ANSYS CFX abgeschätzt. Der geometrische Aufbau der numerischen Simulation entsprach dabei den realen Messgegebenheiten der Messungen zur Validierung und ist in Abbildung 3.11 dargestellt.

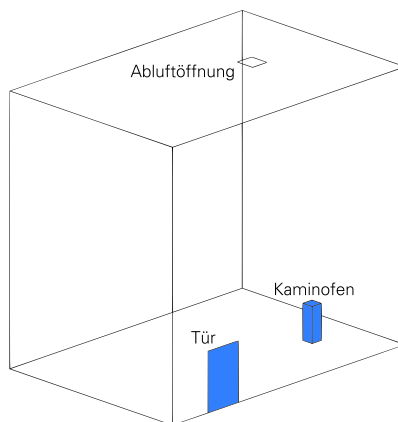


Abbildung 3.11: Geometrischer Aufbau der numerischen Simulation zur Ermittlung des äußeren Wärmeübergangskoeffizienten

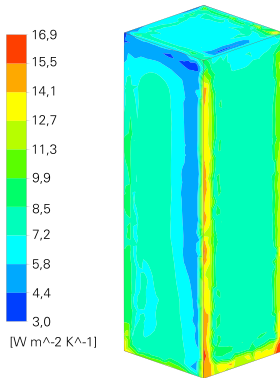


Abbildung 3.12: Lokale Verteilung des Wärmeübergangskoeffizienten auf der idealisierten Kaminofenoberfläche

welche ähnliche Ergebnisse ($6,5 \text{ W/m}^2$ bis $7,2 \text{ W/m}^2$) liefern.

Bei der Simulation wurde der Kaminofen als Quader angenähert und mit einer Oberflächentemperatur von $\vartheta_{\text{au}} = 150^\circ\text{C}$ versehen. Tür und Abluftkanal wurden als Öffnung mit einem statischen Überdruck von 0 Pa definiert. In Abbildung 3.12 und Abbildung 3.13 sind Ergebnisse dieser Berechnungen dargestellt. Erkennbar wird, dass große lokale Unterschiede bei dem Wärmeübergangskoeffizienten existieren, welche ein Flächenmittel von ca. 7 W/m^2 aufweisen. Neben der Strömungssimulation wurden verschiedene empirische Gleichungen aus Müller u. Erhard (1999) und Gnielinski et al. (2006) ausgewertet,

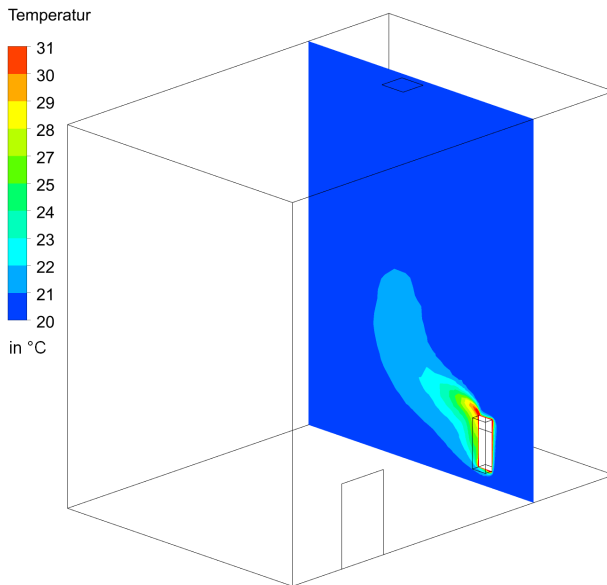


Abbildung 3.13: Lokale Temperaturverteilung auf einer Schnittebene

3.2 Basisgleichungen zur numerischen Strömungssimulation

3.2.1 Erhaltungsgleichungen

Die Software ANSYS CFX ist eine universell einsetzbare, kommerzielle und praxistaugliche Software zur Strömungsberechnung und bietet eine Vielzahl verfügbarer Modelle sowie eine sehr einfache Erweiterbarkeit ohne spezielle Programmierung in C/C++ oder Fortran. Mit ihrer Hilfe können nahezu alle partiellen Differentialgleichungen gelöst werden, die sich in Form einer Transportgleichung formulieren lassen. Standardmäßig implementiert sind die Erhaltungsgleichungen für Impuls, Masse (Gesamtmasse und Speziesmasse) und Energie für Fluide und Festkörper. Nach ANSYS CFX (2011) kommt zur Lösung die elementbasierte Finite-Volumen-Methode zum Einsatz. Trotz erfolgreicher Ansätze mit der Finite-Elemente-Methode in einigen Programmen zur Strömungsberechnung (zum Beispiel COMSOL oder ANSYS POLYFLOW), nimmt die Methode der Finiten-Volumen eine dominierende Stellung bei der Strömungsberechnung ein, da diese bei ingenieurtechnischen Problemstellungen oft anschaulicher und nachprüfbarer ist. Gerade im Bereich der Turbulenzmodellierung, bei der die Gleichungen mitunter empirische Ansätze enthalten, erlaubt die Finite-Volumen-Methode eine Bilanzierung über die Kontrollvolumina und bietet dadurch weitere qualitative und quantitative Überprüfungsmöglichkeiten.

Die nachfolgend dargestellten Gleichungen basieren auf ANSYS CFX (2011), wurden nachvollzogen und teilweise hinsichtlich der verwendeten Symbole angepasst. Sie dienen der besseren Übersicht und ermöglichen die Beschreibung spezieller mathematischer Terme und eine Diskussion der mit ihnen verbundenen Details.

Die Erhaltungsgleichungen für den Impuls können unter Berücksichtigung der Schwerkraft in der Form

$$\frac{\partial(\varrho \underline{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \underline{v} \otimes \underline{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\tau} + \varrho \underline{g} + \underline{S}_{NS} \quad (3.5)$$

dargestellt werden, wobei \underline{v} das Geschwindigkeitsfeld, \underline{g} das Schwerkraftfeld und \underline{S}_{NS} zusätzliche Terme beschreiben. $\underline{v} \otimes \underline{v}$ stellt das dyadische Vektorprodukt des Geschwindigkeitsvektors mit sich selbst dar. Der viskose Spannungstensor $\underline{\tau}$ fasst die durch Reibung auftretenden Spannungen in den drei Koordinatenrichtungen zusammen und weist in kartesischen Koordinaten die Form

$$\underline{\tau} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

auf. Für die einzelnen viskosen Spannungen τ_{ij} (mit $i, j = [x, y, z]$) müssen geeignete Ansätze (auch Materialgesetze genannt) eingesetzt werden, welche einen Zusammenhang zwischen den Spannungen und den Schergeschwindigkeiten herstellen. Für Newtonsche Fluide können die viskosen Spannungen folgendermaßen (für kartesische Koordinaten)

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= \zeta(\nabla \cdot \underline{v}) + 2\mu \frac{\partial v_x}{\partial x} & \tau_{yy} &= \zeta(\nabla \cdot \underline{v}) + 2\mu \frac{\partial v_y}{\partial y} & \tau_{zz} &= \zeta(\nabla \cdot \underline{v}) + 2\mu \frac{\partial v_z}{\partial z} \\ \tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \left[\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right] & \tau_{xz} = \tau_{zx} &= \mu \left[\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right] & \tau_{yz} = \tau_{zy} &= \mu \left[\frac{\partial v_z}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \right] \end{aligned} \quad (3.7)$$

angegeben werden. Der Koeffizient μ ist die dynamische Viskosität, ζ bezeichnet die Volumen- oder Kompressionsviskosität, welche nach der Stokes-Hypothese zu $\zeta = -\frac{2}{3}\mu$ bestimmt werden kann. Beide Konstanten werden auch als Lamé-Viskositäts-Konstanten bezeichnet. Somit kann der viskose Spannungstensor vereinfacht und in die Form

$$\underline{\underline{\tau}} = \mu \left(\nabla \otimes \underline{v} + (\nabla \otimes \underline{v})^T - \frac{2}{3} \delta \nabla \cdot \underline{v} \right) \quad (3.8)$$

überführt werden. δ bezeichnet darin das Kronecker-Delta. Die Erhaltungsgleichung für die Gesamtmasse wird durch die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \underline{v}) = 0 \quad (3.9)$$

beschrieben. Die Energietransportgleichung wird unter Vernachlässigung von viskoser Arbeit und kinetischer Energie sowie unter Annahme konstanter Lewis-Zahlen von $Le_i = \lambda / (c_p \cdot \varrho \cdot D_i) = 1$ in der Form

$$\frac{\partial (\varrho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \underline{v} h) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + S_{\text{Enthalpie}} \quad (3.10)$$

dargestellt. Da in ANSYS CFX die physikalische Größe „Enthalpie“ sowohl die fühlbare als auch die chemische Energie beinhaltet, ist die Berücksichtigung von Reaktionen mit dieser Gleichung automatisch gegeben und der Quellterm $S_{\text{Enthalpie}}$ beinhaltet nur die zusätzlichen Quellterme aufgrund thermischer Strahlung nach Gleichung (3.53). Bei den Feststoffen entfallen der konvektive Term sowie der Quellterm.

Für die einzelnen Spezies i werden Transportgleichungen für deren Massenanteil ξ_i nach

$$\frac{\partial (\varrho \xi_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \underline{v} \xi_i) = \nabla \cdot (\varrho D_{M,i} \nabla \xi_i) + S_{\text{Spezies},i} \quad (3.11)$$

aufgestellt, wobei der Quellterm der i -ten Spezies durch

$$S_{\text{Spezies},i} = M_i \sum_{r=1}^{\text{Anz.Reaktionen}} \left[\frac{\partial C_{r,i}}{\partial t} \right] \quad (3.12)$$

bestimmt wird. $D_{M,i}$ ist der Diffusionskoeffizient der Spezies i im Gemisch, was eine Vereinfachung in Anlehnung an Warnatz et al. (2006) oder Kee et al. (2003) darstellt und nur exakt gilt, wenn die Zusammensetzung der Mischung konstant oder der Diffusionskoeffizient unabhängig von der Zusammensetzung ist. Da der Hauptbestandteil der Mischung Stickstoff ist, kann diese Annahme als Vereinfachung getroffen werden.

3.2.2 Turbulenzmodell

Die zeitliche und räumliche Auflösung in turbulenten Strömungen entspricht der Größe des kleinsten vorstellbaren Wirbels, welche durch die Kolmogorov-Skalen charakterisiert werden. Große Wirbel zerfallen allmählich in kleinere Wirbel und geben ihre Energie dabei ab. Die kleinsten Wirbel geben ihre Energie direkt auf atomarer Ebene in Form thermischer Energie ab.

Eine Simulation mit dieser hohen Auflösung wird als Direkte Numerische Simulation (DNS) bezeichnet. Die angegebenen Erhaltungsgleichungen werden ohne Änderung gelöst. Die darin auftretenden Variablen Druck, Temperatur und Geschwindigkeit sind die zeitlich und örtlich hochaufgelösten und ungemittelten Werte dieser Variablen. Die entsprechenden stationären Werte werden aus der zeitlichen Mittelung dieser Variablen gewonnen. Der enorme Zeit- und Speicheraufwand begrenzt diese Art der Simulation zur Zeit auf Detailuntersuchungen in Räumen mit der Größe von wenigen Kubikzentimetern (je nach Anzahl der Modellgleichungen). Im Normalfall kann der Bilanzraum nicht so hoch aufgelöst werden und es müssen andere Verfahren zum Einsatz kommen. Verfahren nach der Reynolds-Mittelung („*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*“, RANS) basieren auf einer Trennung der in den Erhaltungsgleichungen vorkommenden Variablen Druck, Geschwindigkeit und Temperatur in Mittelwert und Schwankungsgröße. Gemäß ANSYS CFX (2011) werden die Geschwindigkeit, Enthalpie und Speziesmassenanteile durch

$$\underline{v} = \bar{v} + \tilde{v} \quad (3.13)$$

$$h = \bar{h} + \tilde{h} \quad (3.14)$$

$$\xi_i = \bar{\xi}_i + \tilde{\xi}_i \quad (3.15)$$

dargestellt. Durch Umformungen lassen sich Transportgleichungen herleiten, die den Gleichungen für laminare Strömungen (3.5), (3.9) und (3.10) ähneln (wobei die Variablen Mittelwerte sind), aber noch Zusatzterme zur Behandlung der turbulenten Schwankungsgrößen aufweisen. Die Impulsbilanz kann dann durch

$$\frac{\partial(\varrho \underline{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \underline{v} \otimes \underline{v}) = -\nabla \bar{p} + \nabla \cdot (\underline{\tau} - \varrho \underline{\tilde{v}} \otimes \underline{\tilde{v}}) + \varrho \underline{g}, \quad (3.16)$$

die Kontinuitätsgleichung durch

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \underline{v}) = 0, \quad (3.17)$$

die Energieerhaltungsgleichung durch

$$\frac{\partial(\varrho \bar{h})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \underline{v} \bar{h}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla \bar{T} - \varrho \underline{\tilde{v}} \bar{\tilde{h}}) + S_{\text{Enthalpie}} \quad (3.18)$$

und die Speziestransportgleichung mit

$$\frac{\partial(\varrho \bar{\xi}_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \underline{v} \bar{\xi}_i) = \nabla \cdot (\varrho D_{M,i} \nabla \bar{\xi}_i - \varrho \underline{\tilde{v}} \bar{\tilde{\xi}}_i) + S_{\text{Spezies},i} \quad (3.19)$$

dargestellt werden. Der neue Term $\varrho \underline{\tilde{v}} \otimes \underline{\tilde{v}}$ wird als Reynolds-Spannung bezeichnet. Die Terme $\varrho \underline{\tilde{v}} \bar{\tilde{h}}$ und $\varrho \underline{\tilde{v}} \bar{\tilde{\xi}}_i$ werden Reynolds-Flüsse genannt. Die Reynolds-Spannungen können ähnlich dem Newtonschen Schubspannungsansatz definiert werden. Die turbulenten Spannungen sind dabei proportional dem Produkt aus einer turbulenten Zähigkeit und dem Gradienten der mittleren Geschwindigkeit. Somit lassen sich die Reynolds-Spannungen durch

$$-\varrho \underline{\tilde{v}} \otimes \underline{\tilde{v}} = \mu_{\text{turb}} (\nabla \otimes \underline{v} + (\nabla \otimes \underline{v})^T) - \frac{2}{3} \delta (\varrho k + \mu_{\text{turb}} \nabla \cdot \underline{v}) \quad (3.20)$$

ausdrücken. Analog dazu wird der Reynolds-Fluss für die Energie aus

$$-\varrho \overline{\tilde{v} \tilde{h}} = \frac{\mu_{\text{turb}}}{\text{Pr}_{\text{turb}}} \nabla \tilde{h} \quad \text{mit} \quad \text{Pr}_{\text{turb}} = \frac{\mu_{\text{turb}} c_p}{\lambda_{\text{turb}}} \quad (3.21)$$

und der Reynolds-Fluss für die Spezies aus

$$-\varrho \overline{\tilde{v} \tilde{\xi}_i} = \frac{\mu_{\text{turb}}}{\text{Sc}_{\text{turb},i}} \nabla \tilde{\xi}_i \quad \text{mit} \quad \text{Sc}_{\text{turb},i} = \frac{\mu_{\text{turb}}}{D_{\text{turb},i} \cdot \varrho} \quad (3.22)$$

berechnet.

Die turbulente Prandtl-Zahl Pr_{turb} und die turbulente Schmidt-Zahl Sc_{turb} wurden in Anlehnung an die vordefinierten Standardwerte als konstant 0,9 festgelegt. Es existiert eine umfangreiche Literatur zum Thema der turbulenten Prandtl-Zahl, so sind beispielsweise in Reynolds (1975) und Kays (1994) verschiedene Modelle in Abhängigkeit der Turbulenzparameter, Geometrien und Größenverhältnisse angegeben, wonach sich für ingenieurtechnische Anwendungen Werte von $\text{Pr}_{\text{turb}} = 0,7$ bis $\text{Pr}_{\text{turb}} = 0,9$ ergeben und bewährt haben. Hierbei zeigt sich, dass die turbulenten Formulierungen der Navier-Stokes-Gleichungen empirische Konstanten benötigen, welche auf den jeweiligen Anwendungsfall abgestimmt sein müssen.

Die turbulente dynamische Zähigkeit μ_{turb} ist kein Stoffwert, sondern eine durch Turbulenz beeinflusste Größe. Somit wird klar, dass alle durch die Turbulenz hervorgerufenen strömungsmechanischen Effekte letztendlich durch eine Modifikation der Zähigkeit abgebildet werden. Die Turbulenzmodelle mit der Wirbelviskositätsannahme versuchen daher, die turbulente dynamische Zähigkeit μ_{turb} auf geeignete Art und Weise zu bestimmen.

Das für die turbulenten Simulationen verwendete SST-Turbulenzmodell ist ein Zweigleichungsmodell nach Menter (1994), bei dem zwei zusätzliche Transportgleichungen gelöst werden, zum einen für die spezifische Turbulenzenergie k , zum anderen für die spezifische Turbulenzfrequenz ω . Die turbulente Zähigkeit lässt sich durch

$$\mu_{\text{turb}} = \frac{\varrho a_1 k}{\max(a_1 \omega, S F_2)} \quad a_1 = 0,31 \quad (3.23)$$

ausdrücken. S stellt dabei den absoluten Betrag der Dehnungsgeschwindigkeit (engl. strain rate) dar. Die Transportgleichung für k ist durch

$$\frac{\partial(\varrho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \underline{\tilde{v}} k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_{\text{turb}}}{\sigma_{k3}} \right) \nabla k \right] + P_k - \beta' \varrho k \omega \quad (3.24)$$

und die Transportgleichung für ω durch

$$\frac{\partial(\varrho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \underline{\tilde{v}} \omega) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_{\text{turb}}}{\sigma_{\omega 3}} \right) \nabla \omega \right] + (1 - F_1) 2\varrho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla k \nabla \omega + \alpha_3 \frac{\omega}{k} P_k - \beta_3 \varrho \omega^2 \quad (3.25)$$

definiert. Die in den Gleichungen auftretenden Konstanten sind

$$\begin{aligned} \alpha_3 &= F_1 \alpha_1 + (1 - F_1) \alpha_2 & \alpha_1 &= 5/9 & \alpha_2 &= 0,44 \\ \sigma_{k3} &= F_1 \sigma_{k1} + (1 - F_1) \sigma_{k2} & \sigma_{k1} &= 2 & \sigma_{k2} &= 1 \\ \sigma_{\omega 3} &= F_1 \sigma_{\omega 1} + (1 - F_1) \sigma_{\omega 2} & \sigma_{\omega 1} &= 2 & \sigma_{\omega 2} &= 1/0,865 \\ \beta_3 &= F_1 \beta_1 + (1 - F_1) \beta_2 & \beta_1 &= 0,075 & \beta_2 &= 0,0828 \\ & & \beta' &= 0,09. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Die Funktionen F_1 und F_2 sind Überlagerungsfunktionen. F_1 wird innerhalb der Grenzschicht zu eins und sinkt danach kontinuierlich auf null. F_2 ist für Grenzschichtströmungen eins und für Freistrahlsströmungen null. Beide Funktionen werden durch

$$\begin{aligned}
 F_1 &= \tanh(arg_1^4) \\
 \text{mit } arg_1 &= \min\left(\max\left(\frac{\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{\omega y^2}\right), \frac{4\rho k}{CD_{kw} \sigma_{\omega 2} y^2}\right) \\
 \text{und } CD_{kw} &= \max\left(2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla k \nabla \omega, 1 \cdot 10^{-10}\right), \\
 F_2 &= \tanh(arg_2^2) \\
 \text{mit } arg_2 &= \max\left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\nu}{\omega y^2}\right)
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

beschrieben. y ist dabei der kürzeste Abstand zur nächsten Wand mit Haftbedingung und P_k beschreibt die Produktion von Turbulenz mit

$$P_k = \mu_{\text{turb}} S^2. \tag{3.28}$$

Das SST-Modell stellt somit eine Kombination aus k - ϵ und k - ω Modellen dar und vereint die Vorzüge beider Modelle in einem.

3.2.3 Stoffdaten

In den numerischen Simulationen mit ANSYS CFX wurden die physikalischen Größen „Wärmekapazität“, „Enthalpie“, „Entropie“, „Viskosität“ sowie „Wärmeleitfähigkeit“ des Gemisches durch eine ideale Mischung berechnet. Durch Nutzung der Massenanteile zur Mittelwertbildung können die Stoffdaten für das Gemisch mit

$$c_p = \sum_{i=1}^N \xi_i \cdot c_{p,i} \quad h = \sum_{i=1}^N \xi_i \cdot h_i \quad s = \sum_{i=1}^N \xi_i \cdot s_i \tag{3.29}$$

$$\mu = \sum_{i=1}^N \xi_i \cdot \mu_i \quad \lambda = \sum_{i=1}^N \xi_i \cdot \lambda_i \tag{3.30}$$

dargestellt werden. Die dafür benötigten Werte der Wärmekapazitäten, Enthalpien und Entropien der einzelnen Spezies wurden nach Frenklach et al. (2000) durch Polynome 4. Grades in der Form

$$c_{p,i} = R \cdot (a_0 + a_1 \cdot T + a_2 \cdot T^2 + a_3 \cdot T^3 + a_4 \cdot T^4) \tag{3.31}$$

$$h_i = R \cdot \left(a_0 \cdot T + \frac{a_1}{2} \cdot T^2 + \frac{a_2}{3} \cdot T^3 + \frac{a_3}{4} \cdot T^4 + \frac{a_4}{5} \cdot T^5 + a_5\right) \tag{3.32}$$

$$s_i = R \cdot \left(a_0 \cdot \ln(T) + a_1 \cdot T + \frac{a_2}{2} \cdot T^2 + \frac{a_3}{3} \cdot T^3 + \frac{a_4}{4} \cdot T^4 + a_6\right) \tag{3.33}$$

dargestellt, wobei es für jede Spezies zwei Koeffizientensätze für zwei Temperaturbereiche (unterer Bereich: 200 K...1000 K und oberer Bereich: 1000 K...6000 K) gibt. Die Koeffizienten wurden aus Burcat u. Ruscic (2005) entnommen und sind in Anhang B.1 aufgeführt.

Die dynamische Viskosität der einzelnen Spezies wurde nach ANSYS CFX (2011) mit dem „Kinetic Theory Model with Interacting Sphere“ berechnet, welches auf einem modifizierten Ansatz nach Chung et al. (1984) beziehungsweise Chung et al. (1988) basiert. Darin wird die Gleichung

$$\mu_i = 26,69 \cdot 10^{-7} \frac{\sqrt{M_i \cdot T}}{\Omega_i(T) \cdot \sigma_i^2} \quad (3.34)$$

mit dem Kollisionsparameter σ (in Angström) und dem temperaturabhängigen Stoßintegral $\Omega(T)$ angegeben, die sich nach

$$\sigma = 0,809 \cdot \sqrt[3]{\bar{v}_{\text{krit}}} \quad \Omega(T) = A(T^*)^B + C \cdot e^{D \cdot T^*} + E \cdot e^{F \cdot T^*} \quad (3.35)$$

mit den Koeffizienten $A = 1,16145$, $B = -0,14874$, $C = 0,52487$, $D = -0,7732$, $E = 2,16178$, $F = -2,43787$ und der normierten Temperatur $T^* = 1,2593 \cdot \frac{T}{T_{\text{krit}}}$ berechnen lassen. Als Ansatz für die Wärmeleitfähigkeit einer Spezies i wurde das „Modified Eucken“-Modell

$$\lambda_i = \mu_i \cdot (c_{v,i} \cdot 1,32 + 1,77 \cdot R_i) \quad (3.36)$$

nach Poling et al. (2001) (Seite 10.3) ausgewählt. Die zur Berechnung verwendeten kritischen Daten stammen aus Gnielinski et al. (2006) und sind in Anhang B.2 aufgeführt. Das künstliche Gas „Ersatz5“ wurde mit konstanten Werten für die Viskosität von $\mu_{\text{Ersatz5}} = 1 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$, der Wärmeleitfähigkeit von $\lambda_{\text{Ersatz5}} = 1 \cdot 10^{-2} \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ und der Wärmekapazität von $c_{p,\text{Ersatz5}} = 1000 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ definiert. Die Referenzenthalpie für diese Spezies wurde mit $\Delta h_{f,\text{Ersatz5}} = -6,909 \text{ e3 kJ/kg}$ definiert, wodurch sich die Enthalpie aus

$$h_{\text{Ersatz5}} = \Delta h_{f,\text{Ersatz5}} + c_{p,\text{Ersatz5}} \cdot (T - T^+)$$

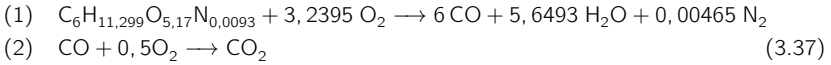
ergibt.

Die kinematischen Diffusionskoeffizienten in der Mischung $D_{M,i}$ für die Spezies-Transportgleichungen wurden gemäß einer Vereinfachung nach ANSYS CFX (2011) für alle Spezies gleich der mittleren kinematischen Viskosität der Mischung $D_{M,i} = \nu = \frac{\mu}{\rho}$ gesetzt. Die Wärmeleitfähigkeit der Feststoffe wurde mit $\lambda_{\text{Scheite}} = 0,2 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$, $\lambda_{\text{Stahl}} = 60 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ und $\lambda_{\text{Gusseisen}} = 80 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ festgelegt.

3.2.4 Verbrennungsmodell

Ausgehend von den Ergebnissen der Voruntersuchungen in den Abschnitten 3.1.1 und 3.1.2 wurden die heterogenen Verbrennungsprozesse nicht direkt modelliert und stattdessen das dort eingeführte künstliche Gas „Ersatz5“ verwendet. Die Verbrennung von „Ersatz5“ und dem daraus entstehenden Kohlenmonoxid wurde mit einem vereinfachten 2-Schritt-Mechanismus

(unter Vernachlässigung der Rückreaktion von Kohlendioxid zu Kohlenmonoxid) mit den Reaktionen



und einer Reaktionskinetik von

$$\begin{aligned} (1) \quad & \frac{\partial C_{\text{C}_6\text{H}_{11,299}\text{O}_{5,17}\text{N}_{0,0093}}}{\partial t} = -4 \cdot 10^{13} \frac{\text{m}^{9,7185}}{\text{kmol}^{3,2395} \cdot \text{s}} \cdot C_{\text{O}_2}^{3,2395} \\ (2) \quad & \frac{\partial C_{\text{CO}}}{\partial t} = -2,239 \cdot 10^{12} \frac{\text{m}^{2,25}}{\text{kmol}^{0,75} \cdot \text{s}} \cdot \exp\left(-\frac{1,674 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{R \cdot T}\right) \cdot C_{\text{CO}} \cdot C_{\text{O}_2}^{0,25} \cdot C_{\text{H}_2\text{O}}^{0,5} \end{aligned} \quad (3.38)$$

bestimmt.

3.2.5 Modell für Filter und Glutbett

Der Filter wurde als eigenes Rechengelände innerhalb des Fluides (Subdomain) definiert, in welchem eine modifizierte Darcy-Gleichung einen zusätzlichen Strömungswiderstand erzeugt. Diese Gleichung beschreibt die zeitliche Druckänderung über der Materialdicke und damit den Impulsverlustterm in Gleichung (3.5) in Abhängigkeit von dem Betrag der Geschwindigkeit ($|v|$).

$$\underline{S_{\text{NS}}} = - \left(\frac{\mu}{k} \cdot |v_i| + \beta^* \cdot \frac{\rho}{2} \cdot |v_i|^2 \right) \quad (3.40)$$

Vom Filterentwickler (Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien, IKTS) wurden die Koeffizienten des Berechnungsmodells für den Druckverlust über der Filterplatte angegeben. Für standardmäßig verwendete Zellweite ergaben sich ein Verlustkoeffizient von $\beta^*=844 \frac{1}{\text{m}}$ und eine spezifische Permeabilität von $k = 5,1 \text{e} - 8 \text{ m}^2$.

Das Glutbett wurde wie der Filter als poröses Material mit dem gleichen Modell für den Druckverlust definiert. Der Verlustkoeffizient betrug beim Glutbett $\beta^*=1000 \frac{1}{\text{m}}$ und die spezifische Permeabilität $k=1,0 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$. Über das Glutbett werden dem Feuerraum 10 % des Holzmassenstromes zugeführt.

3.2.6 Verweilzeitverteilung

Zusätzlich zu den Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Spezies wurde eine benutzerdefinierte Transportgleichung aufgestellt, welche die kumulierte Verweilzeitverteilung t_{RTD} (engl.: „Residence Time Distribution“ beziehungsweise „RTD“) nach Gleichung (3.41) berechnet.

$$\frac{\partial \left(\frac{1}{V} \cdot t_{\text{RTD}} \right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{1}{V} \underline{v} t_{\text{RTD}} \right) = \nabla \cdot \left(\frac{1}{V} D_{\text{RTD}} \nabla t_{\text{RTD}} \right) + \frac{1}{V} \cdot S_{\text{RTD}} \quad (3.41)$$

Diese Transportgleichung hat einen Quellterm mit einem Wert von $S_{\text{RTD}} = 1 \text{ s/s}$ im gesamten Fluidgebiet, d.h. pro durchströmter Zelle wird entsprechend der Durchströmungszeit und des Volumens eine Zeiteinheit hinzugefügt. Die Diffusionskonstante wurde zur Verbesserung der numerischen Stabilität auf einen Wert von $D_{\text{RTD}} = 0,1 \text{ m}^2/\text{s}$ gesetzt. Durch Lösung dieser Transportgleichung entsteht eine integrale Größe, die angibt, wie lange die Verbrennungsluft bis zu diesem Ort benötigt hat. Die Größe kann auch als Fluidalter bezeichnet und im Sinne des Alters der eintretenden Luft bis zu diesem Ort verstanden werden.

3.2.7 Modell für Rußbildung

Der lokale Massenanteil von Ruß wurde mit einem Modellansatz, basierend auf den Arbeiten von Tesner et al. (1971), Magnussen u. Hjertager (1976) sowie Magnussen (2005), berechnet. Dabei wird davon ausgegangen, dass sich Ruß in zwei Stufen bildet: Zuerst erfolgt die Entstehung von Rußbildnern in Form von Radikalen und danach die Ruß(partikel)bildung aus diesen Radikalen. Es werden somit zwei zusätzliche Transportgleichungen gelöst, eine für die spezifische Konzentration der Rußbildner in Form von Radikalen X_{Rb}

$$\frac{\partial(\varrho X_{\text{Rb}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v} X_{\text{Rb}}) = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_{\text{turb}}}{\text{Pr}_{\text{turb}}} \right) \nabla X_{\text{Rb}} \right) + S_{\text{Rb,Entstehung}} + S_{\text{Rb,Verbrennung}}, \quad (3.42)$$

sowie eine zweite für den Rußmassenanteil ξ_{R}

$$\frac{\partial(\varrho \xi_{\text{R}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \mathbf{v} \xi_{\text{R}}) = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_{\text{turb}}}{\text{Pr}_{\text{turb}}} \right) \nabla \xi_{\text{R}} \right) + S_{\text{R,Entstehung}} + S_{\text{R,Verbrennung}}. \quad (3.43)$$

Die Quellterme der Entstehung werden nach Einführung der Konzentrationen

$$C_{\text{Rb}} = \varrho \cdot X_{\text{Rb}} \quad C_{\text{R}} = \frac{\varrho}{N_{\text{A}}} \cdot 1 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kmol}}{\text{mol}} \cdot \frac{\xi_{\text{R}}}{\varrho_{\text{R}} \cdot \pi \cdot d_{\text{R}}/6} \quad (3.44)$$

nach einem Ansatz von Tesner et al. (1971) mit

$$S_{\text{Rb,Entstehung}} = 2,24 \cdot 10^{10} \frac{\text{kmol}}{\text{kg} \cdot \text{s}} \cdot \xi_{\text{Brennstoff,C}} \cdot \varrho \cdot \exp \left(-\frac{90000 \text{ K}}{T} \right) + 100 \frac{1}{\text{s}} \cdot C_{\text{Rb}} - 6,02 \cdot 10^{11} \frac{\text{m}^3}{\text{s} \cdot \text{kmol}} \cdot C_{\text{Rb}} \cdot C_{\text{R}} \quad (3.45)$$

und

$$S_{\text{R,Entstehung}} = \varrho_{\text{R}} \cdot \pi \cdot d_{\text{R}}/6 \cdot \left(1 \cdot 10^5 \frac{1}{\text{s}} - 4,82 \cdot 10^{13} \frac{\text{m}^3}{\text{s} \cdot \text{kmol}} \cdot C_{\text{R}} \right) \cdot C_{\text{Rb}} \quad (3.46)$$

beschrieben. Die Rußdichte ϱ_{R} und der Rußpartikeldurchmesser d_{R} wurden der Datenbank von ANSYS CFX entnommen und betrugen bei den Simulationen $\varrho_{\text{R}} = 2000 \text{ kg/m}^3$ und $d_{\text{R}} = 1,785 \cdot 10^{-8} \text{ m}$. Der Massenanteil von Kohlenstoff im Brennstoff wurde laut Tabelle 3.1 mit $\xi_{\text{Brennstoff,C}} = 0,4333$ festgelegt. Die Quellterme für die Verbrennung wurden nach dem

Modell aus ANSYS CFX (2011) proportional zum Speziesquellterm (siehe Gleichung (3.11)) des Brennstoffes nach

$$S_{\text{Rb,Verbrennung}} = S_{\text{Spezies, } C_6H_{11,299}O_{5,17}N_{0,0093}} \cdot \frac{X_{\text{Rb}}}{\xi_{C_6H_{11,299}O_{5,17}N_{0,0093}}} \quad (3.47)$$

und

$$S_{\text{R,Verbrennung}} = S_{\text{Spezies, } C_6H_{11,299}O_{5,17}N_{0,0093}} \cdot \frac{\xi_{\text{R}}}{\xi_{C_6H_{11,299}O_{5,17}N_{0,0093}}} \quad (3.48)$$

berechnet. Im Falle der Verwendung eines Turbulenzmodells wurde das Konzept der Wirbel-dissipation („*Eddy Dissipation Concept*“, EDC) genutzt, um die Turbulenzeffekte auf die mittlere Reaktionsgeschwindigkeit zu berücksichtigen. Das Modell führt eine Feinstruktur mit eigener örtlicher und zeitlicher Dimension ein und berechnet die Entstehung von Rußbildnern und Ruß dieser Feinstruktur. Die Verbrennungsterme bleiben unberücksichtigt. Weitere Details dieses Modells sind in Magnussen (1989), Ertesvåg u. Magnussen (2001) und Magnussen (2005) zu finden.

Bei Voruntersuchungen wurde festgestellt, dass es mit diesem Rußmodell bei geringen Geschwindigkeiten zu einer rechnerischen Rückdiffusion von Ruß kommt, so dass schon in kalten Zonen ohne Brennstoff Ruß auftritt. Der Grund dafür ist in der Gleichung (3.45) zu finden. Rußbildner können ohne Vorhandensein von Brennstoff in Abhängigkeit der Rußbildnerkonzentration entstehen, es existiert also eine positive Rückkopplung. Aufgrund der Diffusion der Rußbildneradikale kommt es daher zu dieser unerwarteten Entstehung von Ruß in diesen Zonen. Um diesem Phänomen Rechnung zu tragen, wurde die Bildung von Ruß durch eine benutzerdefinierte Senkenfunktion in Zonen mit Temperaturen kleiner 300 K unterbunden, da es fraglich ist, ob es auch in praktischen Fällen zu einer Rückdiffusion in diesem Maße kommen kann und bei solch niedrigen Temperaturen wirklich Ruß stromaufwärts auffindbar ist.

3.2.8 Modell für thermische Strahlung und Spektralmodell (Strahlungseigenschaften)

Die Gleichung für die thermische Strahlung hat eine grundsätzlich andere Form als die Transportgleichungen für den Impuls-, Stoff- und Energietransport. Nach Modest (2001) kann die Verteilung der spektralen Strahlungsintensität (manchmal auch als spektrale Strahlungsenergiestromdichte oder spektrale Strahldichte bezeichnet) in einem emittierenden, absorbierenden und streuenden Medium im allgemeinsten Fall durch

$$\frac{1}{c_0} \cdot \frac{\partial i_\lambda}{\partial t} + \frac{\partial i_\lambda}{\partial s} = \kappa_{a,\lambda} \cdot i_{b,\lambda} + (\kappa_{s,\lambda} - \kappa_{a,\lambda}) \cdot i_\lambda + \frac{\kappa_{s,\lambda}}{4 \cdot \pi} \cdot \int_{4\pi} i_\lambda(\underline{s}') \cdot \Phi(\underline{s}', \underline{s}) d\Omega' \quad (3.49)$$

beschrieben werden. Φ ist die Phasenfunktion der Streuung, die beschreibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Strahl der Richtung \underline{s}' in Richtung \underline{s} gestreut wird. Sie nimmt bei isotroper Streuung den Wert $\Phi = 1$ an. Sowohl in Modest (2001) als auch in ANSYS CFX (2011) wird darauf hingewiesen, dass aufgrund des großen Wertes der Lichtgeschwindigkeit

der instationäre Term für ingenieurtechnische Anwendungen kaum eine Rolle spielt und daher vernachlässigt werden kann. Gleichung (3.49) kann daher zu

$$\frac{d\dot{i}_\lambda}{ds} = \kappa_{a,\lambda} \cdot i_{b,\lambda} + (\kappa_{s,\lambda} - \kappa_{a,\lambda}) \cdot i_\lambda + \frac{\kappa_{s,\lambda}}{4 \cdot \pi} \cdot \int_{4\pi} i_\lambda(\underline{s}') \cdot \Phi(\underline{s}', \underline{s}) d\Omega' \quad (3.50)$$

vereinfacht werden. Diese Integro-Differentialgleichung hat eine Lagrange'sche Form, es wird also entlang eines Ortes integriert (mitbewegter Beobachter). In den meisten Veröffentlichungen zum Thema Verbrennungssimulation wird die Streuung vernachlässigt (Floyd et al. (2001), Lautenberger (2002), Mangani (2008), Novozhilov et al. (1996), Yan u. Holmstedt (1996), Yang et al. (2003)), da die Absorption und Emission die dominierenden Effekte darstellen. In Lockwood et al. (1986) wird eine Gleichung für den Streukoeffizienten angegeben, die für Kohlepartikel in Kohlestaubfeuerungen gilt. In der vorliegenden Arbeit wird die Streuung nicht berücksichtigt und der spektrale Streukoeffizient mit $\kappa_{s,\lambda} = 0$ festgelegt. Dadurch kann die Strahlungstransportgleichung weiter zu

$$\frac{d\dot{i}_\lambda}{ds} = \kappa_{a,\lambda} \cdot i_{b,\lambda} - \kappa_{a,\lambda} \cdot i_\lambda = \kappa_{a,\lambda} \cdot (i_{b,\lambda} - i_\lambda) \quad (3.51)$$

umgeformt werden. Diese Gleichung beschreibt die Strahlungsintensität einer bestimmten Wellenlänge entlang eines bestimmten Weges. Der vektorielle Strahlungswärmestrom auf einer beliebigen Fläche ergibt sich aus dem Integral von i_λ über alle möglichen Raumwinkel und alle Wellenlängen zu

$$\underline{q}^R = \int_0^\infty \underline{q}_\lambda^R = \int_0^\infty \int_{4\pi} i_\lambda(\underline{s}) \cdot \underline{s} d\Omega d\lambda, \quad (3.52)$$

was einer Bilanz von einfallender und emittierter Strahlung gleichkommt (siehe Modest (2001)). Zur Kopplung mit der Transportgleichung für die Energie wird eine Strahlungsenergiebilanz für ein Kontrollvolumen aufgestellt und die Divergenz der Strahlungswärmeströme über alle Wellenlängen integriert. Der Zusatzterm in der Energieerhaltungsgleichung (3.10) wird nach Modest (2001) S. 278 mit

$$S_{\text{Enthalpie}} = \nabla \cdot \underline{q}^R = \nabla \cdot \int_0^\infty \underline{q}_\lambda^R d\lambda = \int_0^\infty \left(\kappa_{\lambda,a} \left(4\pi i_{b,\lambda} - \int_{4\pi} i_\lambda d\Omega \right) \right) d\lambda \quad (3.53)$$

berechnet. Gleichung (3.51) kann integriert und somit die Strahlungsintensität in Abhängigkeit des Weges eines bestimmten Strahles mit

$$i_\lambda = i_{b,\lambda} (1 - \exp(-\kappa_{a,\lambda} \cdot s)) + i_{0,\lambda} \cdot \exp(-\kappa_{a,\lambda} \cdot s) \quad (3.54)$$

angegeben werden. Im Modell der diskreten Strahlen wird, ausgehend von den Wandzellen, eine endliche Anzahl von unveränderlichen Strahlen durch das Rechengebiet gelegt und dieses dadurch diskretisiert. Für jeden Strahl wird Gleichung (3.54) aufgestellt und gelöst.

Das Spektralmodell „*Weighted-Sum-of-Gray-Gases*“ (WSGG) nach Hottel u. Sarofim (1967) geht davon aus, dass der totale Absorptionsgrad α und der Emissionsgrad ϵ im thermodynamischen Gleichgewicht gleich sind (siehe dazu Modest (2001) S. 267 ff.) und sich einer aus einer gewichteten Summe von N grauen Gasen (Laufindex i) durch

$$\epsilon(T, s) = \alpha(T, s) = \sum_{i=0}^N a_i(T) \left(1 - e^{-\kappa_{a,i} \cdot s} \right) \quad (3.55)$$

darstellen lassen. Wie in Yeoh u. Yuen (2009) S. 223 beschrieben, kann der Wichtungsfaktor a_i physikalisch als Anteil an der Energie des Schwarzen Strahlers interpretiert werden, der einen Absorptionskoeffizienten von κ_i aufweist, wie in Abbildung 3.14 illustriert.

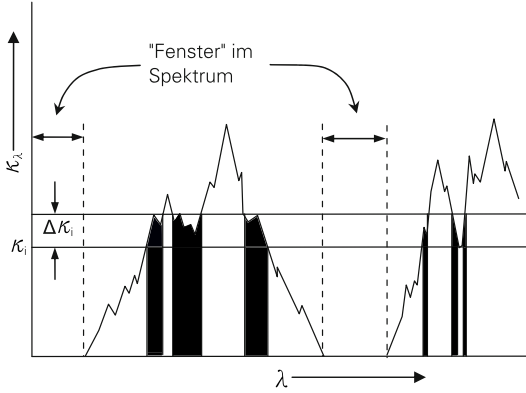


Abbildung 3.14: Interpretation des Wichtungsfaktors in Form der spektralen Energieverteilung (entnommen aus Yeoh u. Yuen (2009))

Aus dem Lambert-Beerschen Gesetz

$$\alpha = 1 - \tau = 1 - e^{-\kappa_a \cdot s}, \quad (3.56)$$

lässt sich für den mittleren Absorptionskoeffizienten die Gleichung

$$\kappa_a = \frac{-\ln(1 - \alpha)}{s} \quad (3.57)$$

ableiten. Diese ursprüngliche Formulierung des WSGG-Modells benötigt somit die Weglänge s zur Berechnung des mittleren Absorptionskoeffizienten und nutzt diese zusammen mit einer Strahlungstransportgleichung für ein graues Gas. Wie in Ströhle (2004) diskutiert, kann das Lambert-Beersche Gesetz nur für graue Gase und nicht für nicht-graue Gase genutzt werden. Modest (1991) zeigte hingegen, dass die Absorptionskoeffizienten und Wichtungsfaktoren der N grauen Gase direkt auf N Strahlungstransportgleichungen (mit Laufindex i) nach

$$\frac{d i_i}{d s} = \kappa_{a,i} \cdot (a_i \cdot i_{b,\lambda} - i_i) \quad (3.58)$$

angewendet werden können. Unter Nutzung eines nicht-grauen Gases benötigt diese Formulierung somit keine Weglänge und weist dadurch eine höhere Genauigkeit als mit der Formulierung für ein graues Gas auf. Da für eine unendlich große Weglänge der Absorptionsgrad eins wird, muss für die temperaturabhängigen Wichtungsfaktoren a_i

$$\sum_{i=0}^N a_i(T) = 1 \quad (3.59)$$

gelten. Um die „Fenster“ in der spektralen Energieverteilung abzubilden, wird der Wichtungsfaktor des ersten grauen Gases nach

$$a_0 = 1 - \sum_{i=1}^N a_i(T) \quad (3.60)$$

berechnet und der Absorptionskoeffizient mit $\kappa_{a,0} = 0$ festgelegt. In der Literatur existieren verschiedene Angaben für die temperaturabhängigen Wichtungsfaktoren, wobei sie meist in der Form von Polynomen, wie zum Beispiel

$$a_i = \sum_{j=1}^J b_{i,j} \cdot T^{j-1}, \quad (3.61)$$

angegeben werden. Die Absorptionskoeffizienten hängen von der Gaszusammensetzung ab und sind druck- und konzentrationsabhängig. Sie werden oft für Kohlendioxid-Wasserdampf-Verhältnisse von $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$ (für Methanverbrennung) oder $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$ (für Ölverbrennungen) angegeben. In Smith et al. (1982), Modest (2001) und Yin et al. (2010) werden die Absorptionskoeffizienten in Abhängigkeit des Kohlendioxid- und Wasserdampfanteils bestimmt. Zusätzlich wird in Modest (2001) auch die Rußkonzentration berücksichtigt. Bei der Holzverbrennung in Kaminöfen treten lokal große Konzentrationen von Kohlenmonoxid auf und es stellen sich Kohlendioxid-Wasserdampf-Verhältnisse von $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$ ein. Daher wurde ein Ansatz nach ANSYS CFX (2011) mit den Koeffizienten für Öl nach Tabelle 3.3 genutzt. Dieser Ansatz berücksichtigt neben Kohlendioxid explizit Kohlenmonoxid und bestimmt den Absorptionskoeffizienten nach

$$\kappa_{a,i} = k_{\kappa 1,i} \cdot (p_{\text{H}_2\text{O}} + p_{\text{CO}_2} + p_{\text{CO}}) + k_{\kappa 2} \cdot p_{\text{HC}}, \quad (3.62)$$

wobei p_{HC} der Partialdruck der unverbrannten Kohlenwasserstoffe ist. Wie aus vereinfachten Verbrennungsrechnungen und Messdaten (siehe Tabellen 4.12 und 4.1) ersichtlich, liegt das Verhältnis von Kohlendioxid zu Wasserdampf im Abgas im Bereich von 1. Aus diesem Grund wurde dieses Verhältnis für die nachfolgenden Berechnungen der Absorptions- und Emissionsgrade mit den vier Modellen (Smith et al. (1982), Modest (2001), Yin et al. (2010) und Modest (2001)) verwendet.

Tabelle 3.3: Koeffizienten der Wichtungsfaktoren und Absorptionskoeffizienten für das WSGG-Modell aus ANSYS CFX (2011) für ein Verhältnis $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$

i	$b_{i,1}$	$b_{i,2}$ in K^{-1}	$k_{\kappa 1,i}$ in $\text{m}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$	$k_{\kappa 2,i}$ in $\text{m}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$
1	0,4092	$7,53 \cdot 10^{-5}$	0	3,41
2	0,284	$2,58 \cdot 10^{-5}$	0,91	0
3	0,211	$-6,54 \cdot 10^{-5}$	9,4	0
4	0,0958	$-3,57 \cdot 10^{-5}$	130	0

In den Abbildungen 3.15 und 3.16 sind die Emissions- und Absorptionsgrade für ein angenommenes Gasgemisch (in Anlehnung an Abgas bei Verbrennung mit Luftverhältnis von

$\lambda_L = 2$, siehe Tabelle 4.12) in Abhängigkeit von der Temperatur und der Weglänge für die vier Modelle dargestellt. Die Unterschiede zwischen den Modellen betragen bis zu 10 %.

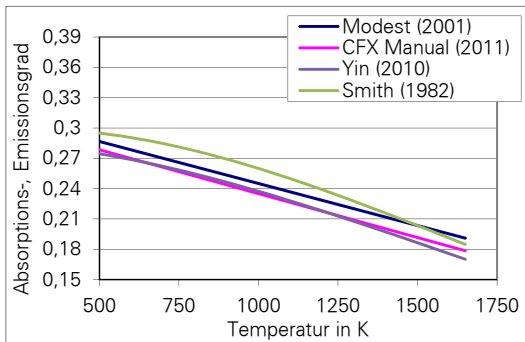


Abbildung 3.15: Vergleich der Absorptions- und Emissionsgrade in Abhängigkeit der Temperatur für ein Gasgemisch mit $\psi_{\text{CO}_2} = 0,1$, $\psi_{\text{H}_2\text{O}} = 0,1$ und $\psi_{\text{N}_2} = 0,8$ bei einer Weglänge von $s = 1$ m

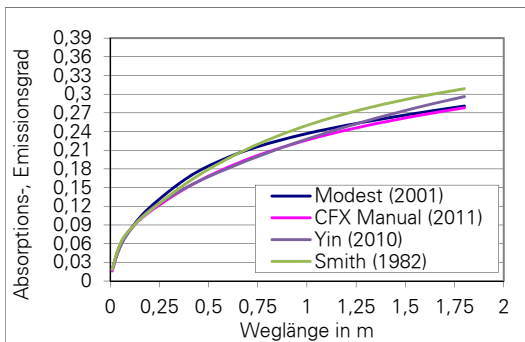


Abbildung 3.16: Vergleich der Absorptions- und Emissionsgrade in Abhängigkeit der Weglänge für ein Gasgemisch bei 1 atm mit $\psi_{\text{CO}_2} = 0,1$, $\psi_{\text{H}_2\text{O}} = 0,1$ und $\psi_{\text{N}_2} = 0,8$ und einer Temperatur von $T = 1100$ K

Im Gegensatz zu den Konzentrationen im Abgas treten im Glutbett und unmittelbar an der Scheitoberfläche sehr hohe Kohlenmonoxid- und Wasserdampfanteile auf. Die Modelle von Smith et al. (1982), Modest (2001) und Yin et al. (2010) berücksichtigen den Kohlenmonoxidanteil nicht. Das Modell nach ANSYS CFX (2011) bezieht hingegen den Kohlenmonoxidanteil mit in die Berechnung ein. Um diesen Einfluss von Kohlenmonoxid abzuschätzen, wurde (basierend auf den Ergebnissen der später dargestellten Simulationen) ein Gasgemisch mit

hohem Kohlenmonoxid- und Wasseranteil von $\psi_{\text{CO}} = 0,17$, $\psi_{\text{H}_2\text{O}} = 0,21$ und $\psi_{\text{N}_2} = 0,62$ definiert, welches an der Scheitoberfläche vorkommen kann. Für dieses Gasmisch wurden die Absorptions- und Emissionsgrade mit den vier Modellen (Smith et al. (1982), Modest (2001), Yin et al. (2010) und Modest (2001)) erneut berechnet und die Ergebnisse in den Abbildungen 3.17 und 3.18 dargestellt. Es wird deutlich, dass bei hohen Kohlenmonoxidkonzentrationen der Ansatz von ANSYS CFX (2011) um bis zu 33 % größere Absorptions- und Emissionsgrade berechnet. Das entspricht der Erwartung, da größere Anteile von strahlungsaktiven Gasen auch größere Absorptions- und Emissionsgrade ergeben sollten. Im Gegensatz zu 3.15 und 3.16 mit einem Volumenanteil der strahlungsaktiven Gasspezies von $\psi_{\text{Strahler}} = \psi_{\text{CO}_2} + \psi_{\text{H}_2\text{O}} = 0,2$, liegt in den Abbildungen 3.17 und 3.18 der Volumenanteil der strahlungsaktiven Gasspezies bei $\psi_{\text{Strahler}} = \psi_{\text{CO}} + \psi_{\text{H}_2\text{O}} = 0,38$. Aus diesem Grund wurde das Modell nach ANSYS CFX (2011) für die numerischen Simulationen genutzt.

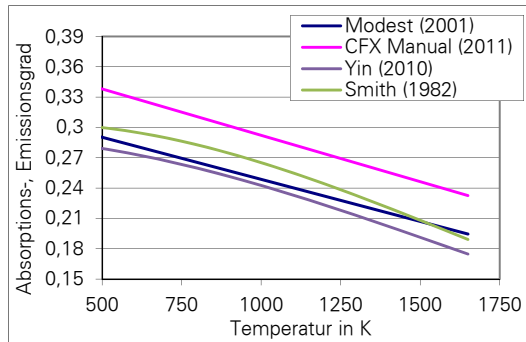


Abbildung 3.17: Vergleich der Absorptions- und Emissionsgrade in Abhängigkeit der Temperatur für ein Gasmisch mit $\psi_{\text{CO}} = 0,17$, $\psi_{\text{H}_2\text{O}} = 0,21$ und $\psi_{\text{N}_2} = 0,62$ bei einer Weglänge von $s = 1$ m

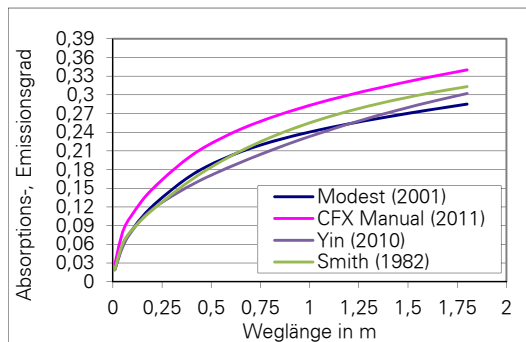


Abbildung 3.18: Vergleich der Absorptions- und Emissionsgrade in Abhängigkeit der Weglänge für ein Gasmisch bei 1 atm mit $\psi_{\text{CO}} = 0,17$, $\psi_{\text{H}_2\text{O}} = 0,21$ und $\psi_{\text{N}_2} = 0,62$ und einer Temperatur von $T = 1100$ K

Der Einfluss von Ruß auf den Absorptionskoeffizienten wurde mittels eines Modells nach ANSYS FLUENT (2011) implementiert und für das nichtgraue Spektralmodell angepasst, wodurch er sich aus der Summe von Gas und Ruß

$$\kappa_{a,i,\text{gesamt}} = \kappa_{a,R} + \kappa_{a,i} \quad (3.63)$$

zusammensetzt. Der Absorptionskoeffizient von Ruß wurde nach ANSYS FLUENT (2011) durch

$$\kappa_{a,R} = 1232,4 \frac{\text{m}^2}{\text{kg}} \cdot \rho_R \cdot \% \cdot \left[1 + 4,8 \cdot 10^{-4} \frac{1}{\text{K}} \cdot (T - 2000 \text{ K}) \right] \quad (3.64)$$

berechnet. Im Glutbett und dem Filter wurde der Absorptionskoeffizient auf einen Wert von $\kappa_{a,i} = 100 \text{ m}^{-1}$ gesetzt, wodurch diese Zonen nahezu schwarze Strahler werden. Höhere Werte hingegen führen zu numerischen Instabilitäten.

3.3 Geometrie, Diskretisierung und Randbedingungen der numerischen Simulationen zur Validierung

3.3.1 Geometrischer Aufbau und Rechengitter

Die ursprüngliche Konstruktion des Kaminofens erfolgte durch den Hersteller der Kaminöfen in der Konstruktionssoftware Inventor der Firma Autodesk. Da an der Professur für Technische Thermodynamik der TU Dresden die Software Solidworks der Firma Dassault Systèmes Solid-Works Corporation verwendet wird, erfolgte der Datenaustausch über das STEP-Dateiformat. Aufgrund der Nutzung eines Zwischendateiformates gingen ein Großteil der Strukturinformationen (Bauteile, Baugruppen) sowie alle Möglichkeiten der Parameteränderungen (zum Beispiel Änderung von Abmessungen und geometrischen Abhängigkeiten) verloren, was den Bearbeitungsaufwand deutlich erhöhte. Die meisten der Bauteile wiesen einen sehr hohen Detaillierungsgrad auf (Schweißnähte, Abrundungen) oder führten mit den Nachbarbauteilen zu ungünstigen geometrischen Verhältnissen (kleine Zwischenräume, Spalte, spitze Winkel) und genügten somit nicht den Anforderungen einer späteren Gittergenerierung. Letztendlich mussten aufgrund der besonderen Anforderungen der CFD-Simulation fast alle Teile gänzlich neu konstruiert beziehungsweise grundlegend überarbeitet werden, wobei zwischenzeitlich immer wieder getestet wurde, ob eine Vernetzung möglich ist. Es wurde entschieden, dass die Modellierung der komplexen Mechanik der Lufteinlässe unterbleibt und die auftretenden Strömungsvorgänge in diesem Teil der Kaminöfen nicht berücksichtigt werden. Diese Entscheidung hat Auswirkungen auf die verwendeten Randbedingungen, welche später beschrieben werden.

Beide Kaminöfen sind für Holz und Kohle als Brennstoff ausgelegt, wurden im Rahmen dieser Untersuchung aber ausschließlich mit Holz betrieben. Für den Betrieb mit Holz wird die Luftzufuhr durch den Rost nicht benötigt und durch Aufbringen einer Ascheschicht unterbunden. In der Simulation ist der Rost stoffdicht. Das in der Realität vorkommende Glutbett in der Gussmulde, bestehend aus alter Asche, wurde als eigener Bereich über dem Rost in der Simulation abgebildet. Die für die Holzverbrennung benötigte Luft gelangt somit größtenteils

als Scheibenspülluft in den Feuerraum. In dem Modell wurde daher ein Körper „Glutbett“ konstruiert, welcher diesen Sachverhalt wiedergeben soll.

In den Abbildungen 3.19 und 3.20 sind die Berechnungsgeometrien der beiden Kaminöfen dargestellt. Rot eingezeichnet sind die Filterplatten. Der Kaminofen „K 1“ besitzt zwei Umlenkplatten im Abgasweg (gelb in Abbildung 3.19). Die Einlass- und Auslassstutzen sind aus numerischen Gründen verlängert worden (Erzeugung eines gleichmäßigeren Strömungsprofils). Die drei Holzscheite liegen genau auf dem Glutbett.

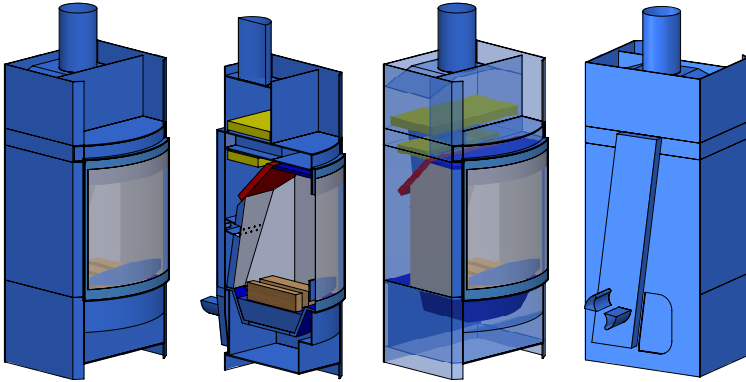


Abbildung 3.19: Geometrie der numerischen Simulation des Kaminofens „K 1“

Beim Kaminofen „K 1“ wird die Luft entlang der Rückseite über einen Kanal nach oben geführt und dann mittig durch einen Kanal mit rechteckigem Querschnitt, das Abgas kreuzend, zur Vorderseite geleitet. Auf der Vorderseite befindet sich ein Sammelraum mit der gesamten Breite des Kaminofens, von dem die Luft als Scheibenspülluft dem Feuerraum zugeführt wird.

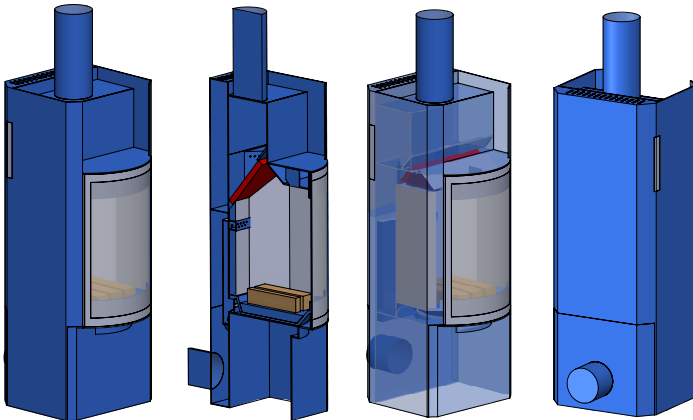


Abbildung 3.20: Geometrie der numerischen Simulation des Kaminofens „K 2“

Kaminöfen „K 2“ ist schmaler und höher als „K 1“ und weist eine grundsätzlich andere Luftzuführung auf. Die Luft steigt hinter der Feuerraumwand auf und wird seitlich am Filter vorbei zur Tür geführt.

Ausgehend von der Geometrie wurden unterschiedliche Gitter (Anzahl Zellen, Zelltyp, Prismenschichten) untersucht. Dabei blieben die unteren Totraumvolumen der beiden Kaminöfen jeweils unberücksichtigt und wurden nicht vernetzt. Bei dem Kaminofen „K 2“ wurde der Luftraum zwischen hinterem Abdeckblech und der Rückwand ebenfalls nicht vernetzt. Abbildung 3.21 und Abbildung 3.22 bilden beide Gitter ab, wobei die verlängerten Abgaskanäle abgeschnitten wurden. Es wurde darauf geachtet, dass trotz der komplexen Geometrie so viele Flächen wie möglich mit Prismenschichten versehen wurden, um den Fehler bei der Berechnung des Wärmeübergangs so gering wie möglich zu halten. Eine Untersuchung der Gitterabhängigkeit mit schrittweiser Erhöhung der Zellenanzahl (siehe Abschnitt 4.7.2) lieferte für „K 1“ 4,8 Millionen Zellen und für „K 2“ 3,1 Millionen Zellen.

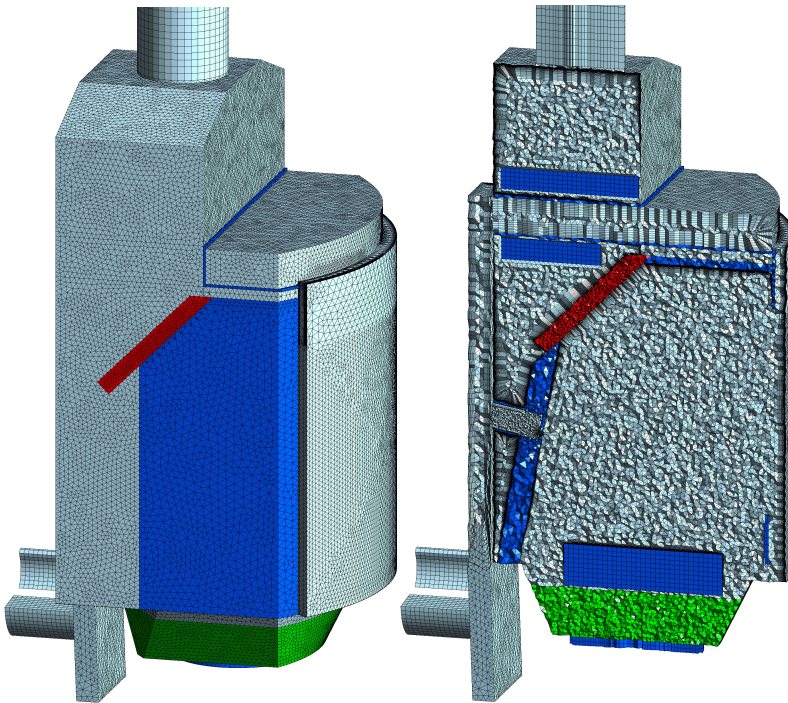


Abbildung 3.21: Gitter der numerischen Simulation des Kaminofens „K 1“ (blau = Festkörper, rot = Filter, grün = Glutbett)

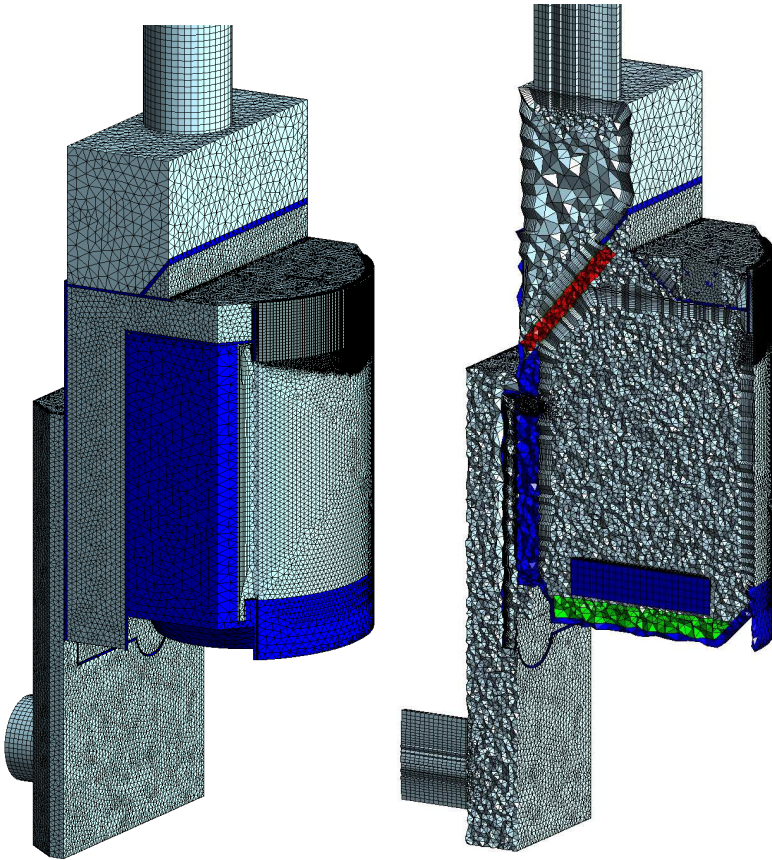


Abbildung 3.22: Gitter der numerischen Simulation des Kaminofens „K 2“ (blau = Festkörper, rot = Filter, grün = Glutbett)

3.3.2 Randbedingungen

Die Scheitoberfläche wurde als halbdurchlässige, adiabate Wand mit einem Emissionskoeffizienten von 1 definiert, deren Temperatur sich aus der Energiebilanz (thermische Strahlung und konvektive Ströme) ergibt. Der Wärmeübergangskoeffizient ergibt sich aus den Strömungseigenschaften und muss nicht vorgegeben werden. Gleichzeitig tritt über diese Wand ein Massenstrom des Ersatzgases „Ersatz5“ (siehe Tabelle 3.1) entsprechend 90 % des Wertes aus Tabelle 4.9 (da 10 % im Glutbett zugeführt werden) mit konstant 25 ° C ein. Da die Referenzenthalpie bei 25 ° C gilt und aus dem Heizwert berechnet wurde (siehe oben), wird

somit der dem Heizwert entsprechende Enthalpiestrom zugeführt. Das Ersatzgas wird an der Oberfläche sofort erwärmt und kühlt die Scheitoberfläche dabei ab. Über die Wärmekapazität des Ersatzgases wird demnach die Scheitoberflächentemperatur beeinflusst.

Die **Außenwände** (inklusive Scheibe und Oberseite) des Gehäuses sind als Wände mit einem totalen Wärmeübergangskoeffizienten von

$$\alpha_{\text{tot}} = \underbrace{7 \frac{\text{W}}{\text{K} \cdot \text{m}^2}}_{\text{Konvektion}} + \underbrace{0,9 \cdot 5,67 \frac{\text{W}}{\text{K}^4 \cdot \text{m}^2} \cdot \left(\left(\frac{T}{100} \right)^4 - \left(\frac{293,15\text{K}}{100} \right)^4 \right)}_{\text{thermische Strahlung}} \quad (3.65)$$

berücksichtigt worden, welcher den konvektiven Wärmestrom und den Wärmestrom aufgrund von thermischer Strahlung an die Umgebung (mit konstant 20 °C) beinhaltet. Diese Randbedingung wurde mittels benutzerdefinierter Gleichungen in ANSYS CFX implementiert. Der Wärmeübergangskoeffizient von $\alpha_{\text{konv}} = 7 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$ für die Konvektion wurde durch empirische Gleichungen und numerische Untersuchungen ermittelt, deren Geometrie sich an den realen Gegebenheiten des Prüfstandes orientiert und im Abschnitt 3.1.3 beschrieben wird.

Es wurde festgestellt, dass die Geometrie der Luftzufuhr nur schwer modelliert werden kann. Das liegt hauptsächlich an den Luftzufuhrklappen und mechanisch verstellbaren Schließbeziehungsweise Öffnungsmechanismen, deren Stellung durch verschiedene Stell- und Regelmechanismen beeinflusst wird und daher nicht ausreichend definiert ist. Ein weiterer Grund ist die hohe Komplexität der Geometrie, die eine Vernetzung erschwert und die in Abbildung 3.23 und Abbildung 3.23 dargestellt wird. Die genaue Festlegung der realen Verhältnisse ist für eine Simulation mit einer Öffnungs-Randbedingung, bei der sich der Massenstrom durch das Druckfeld ergibt, zwingend notwendig.

Aus diesem Grund wurde die Geometrie der Luftzufuhr im Berechnungsmodell weitestgehend vereinfacht und am Lufteinlass eine Massenstromrandbedingung, die zu einem Luftverhältnis nach Tabelle 4.1 führt, angesetzt.

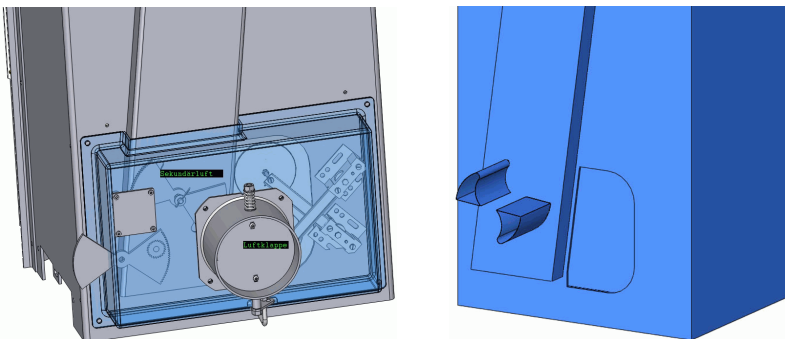


Abbildung 3.23: Detailansicht der Luftzufuhr beim Kaminofen „K 1“ (links = originale Konstruktion, rechts = vereinfachtes Modell für die numerische Simulation)

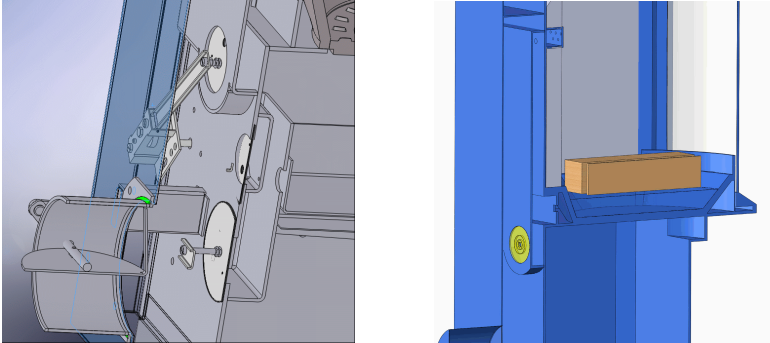


Abbildung 3.24: Detailansicht der Luftzufuhr beim Kaminofen „K 2“ (links = originale Konstruktion, rechts = vereinfachtes Modell für numerische Simulation)

3.4 Untersuchungen zur numerischen Lösung und Abschätzung von Modelleinflüssen

3.4.1 Einstellungen und Besonderheiten des Lösungsverfahrens

Die numerische Lösung des zu lösenden Systems partieller Differenzialgleichungen hängt von mehreren Einflussfaktoren ab und wird durch eine Reihe von Besonderheiten erschwert. Als Erstes ist dabei die Steifigkeit zu nennen, d.h., die Zeitskalen der verschiedenen Differenzialgleichungen unterscheiden sich um mehrere Größenordnungen, wobei die chemischen Reaktionen die kleinsten Zeitskalen aufweisen und das thermische Verhalten der Festkörper die größten Zeitskalen zeigt. Zur Behandlung der chemischen Reaktionen ist in ANSYS CFX ein spezieller Gleichungslöser für Reaktionen implementiert, der erst auf Nachfrage von der ANSYS-Benutzerunterstützung bereitgestellt und mittels „Expert Parameter“-Kommandos eingebunden wurde. In mehreren Voruntersuchungen unterschiedlicher Dimension und Geometrie wurden die Parameter bestimmt, welche den besten Kompromiss aus Lösungsgeschwindigkeit und Konvergenz darstellen:

```
stiff chemistry = t
stiff chemistry cutoff mf = 1e-10
stiff chemistry expt urf = 0.5
stiff chemistry fts urf = 0.09
stiff chemistry full jacobian = t
stiff chemistry sol change fac = 0.6
```

Ohne den Gleichungslöser für steife Reaktionen ist keine Lösung zu erreichen, da die Spezies-quotienten unlimitiert in die Energieerhaltungsgleichung eingehen und zu einem extremen Tem-

peraturanstieg führen. Der Temperaturanstieg wiederum führt zu einer positiven Rückkopplung auf die Reaktionsgeschwindigkeiten, zu einem Überlauf der Temperaturen, Geschwindigkeiten und Dichten und somit schließlich zu einem Abbruch der Berechnung. Durch Wahl von sehr kleinen Zeitschrittweiten für die Erhaltungsgleichungen kann dieses Problem zwar verhindert werden, doch ist eine Lösung von praktischen Problemen dadurch nahezu ausgeschlossen, da viel zu kleine Zeitschrittweiten nötig sind, viele der Erhaltungsgleichungen aber eine große Zeit bis zur Konvergenz benötigen. Tests ergaben Zeitschrittweiten von bis zu $\Delta t = 1 \cdot 10^{-8}$ s, was Berechnungszeiten von mehreren Monaten bedeuten würde.

Der Gleichungslöser für steife Reaktionen löst intern das gewöhnliche Differenzialgleichungssystem der miteinander gekoppelten Reaktionsgeschwindigkeiten in jedem Kontrollvolumen und verhindert so, dass die Speziesquellterme voneinander entkoppelt werden. Gekoppelte, schnelle und langsame Reaktionen beziehungsweise steife Reaktionssysteme werden durch spezielle Verfahren (mit Zeitschrittweitensteuerung) effizient berechnet und aus dem Ergebnis werden dann die Speziesquellterme für die Erhaltungsgleichungen bestimmt. Dadurch erfolgt die Berechnung der Speziesquellterme unabhängig von der Zeitschrittweite der übrigen Erhaltungsgleichungen und die partiellen Differentialgleichungen der Erhaltungsgleichungen werden schneller und besser lösbar. Letztendlich wurden Zeitschrittweiten von etwa $\Delta t = 1 \cdot 10^{-2}$ s verwendet.

Zusätzlich zur Behandlung der Steifigkeit der Reaktionen und der Erhaltungsgleichungen müssen Verfahren eingesetzt werden, um die Massenanteile der Spezies zwischen null und eins zu halten. Dazu wird der Speziesquellterm nach

$$S_{\text{Spezies},i,\text{lin}} = \left(\frac{S_{\text{Spezies},i} - |S_{\text{Spezies},i}|}{2 \cdot \max(\epsilon, \xi_i)} \right) \cdot \xi_i + \left(\frac{S_{\text{Spezies},i} + |S_{\text{Spezies},i}|}{2 \cdot \max(\epsilon, 1 - \xi_i)} \right) \cdot (1 - \xi_i) \quad (3.66)$$

linearisiert, wobei $\epsilon = 1 \cdot 10^{-6}$ ist. Dadurch wird erreicht, dass bei positivem Quellterm der erste Term auf der rechten Seite in Gleichung (3.66) null wird und der Speziesquellterm

$$S_{\text{Spezies},i,\text{lin}} = \begin{cases} S_{\text{Spezies},i} & \text{wenn } \xi_i \leq 1 - \epsilon \\ S_{\text{Spezies},i} \left(\frac{1 - \xi_i}{\epsilon} \right) & \text{wenn } \xi_i > 1 - \epsilon \end{cases} \quad (3.67)$$

ist. Bei negativem Quellterm beziehungsweise einem Senkenterm wird in Gleichung (3.66) der zweite Term auf der rechten Seite 0 und der Speziesquellterm ergibt sich aus

$$S_{\text{Spezies},i,\text{lin}} = \begin{cases} S_{\text{Spezies},i} & \text{wenn } \xi_i \geq \epsilon \\ S_{\text{Spezies},i} \left(\frac{\xi_i}{\epsilon} \right) & \text{wenn } \xi_i < \epsilon \end{cases} \quad (3.68)$$

In ANSYS CFX (2011) ist bis zur aktuellen Version (14) die Fallunterscheidung bei positivem Quellterm nicht korrekt dargestellt - mit $\xi_i \geq 1 - \epsilon$ in der ersten Zeile von Gleichung (3.67). Die Ergebnisse der numerischen Simulationen sind davon aber unbeeinflusst.

Zur Beurteilung der Qualität der Berechnungsergebnisse wurden bei allen numerischen Simulationen Monitorpunkte definiert, welche die wichtigsten integralen Rechenergebnisse

während der Lösung darstellen. Dazu gehören die Abgasparameter (Zusammensetzung und Temperatur), die Heizleistung sowie die mittlere Temperatur an der Scheitoberfläche. Als Konvergenzkriterium wurde ein maximales Residuum von $1 \cdot 10^{-4}$ festgelegt. Als Nebenbedingung wurde festgelegt, dass die Bilanzgleichungen integriert über das gesamte Rechengebiet zu mindestens 99,9 % erfüllt sein müssen. Das bedeutet, dass die Bilanzen einer Größe (zum Beispiel Masse, Energie, Impuls, etc.) über alle Ränder des Berechnungsgebietes, bezogen auf den maximal auftretenden Wert der jeweiligen Bilanzgröße, nicht größer als 0,1 % sein dürfen. Die Lösung wurde abgebrochen, wenn alle Bedingungen erfüllt waren und sich auch qualitativ die Monitorpunkte nicht mehr ändern. Darüber hinaus wurde jedes Ergebnis qualitativ in mehreren Schnittebenen auf unlogische beziehungsweise physikalisch unsinnige Werte hin untersucht.

Für die numerischen Simulationen kam das „Upwind“-Verfahren als Diskretisierungsschema zum Einsatz, da es am stabilsten war und in vielen Fällen erst eine Konvergenz ermöglichte. Wie in Lecheler (2009) ausführlich dargestellt, handelt es sich um das einfachste denkbare Verfahren zur Diskretisierung mit der größten numerischen Diffusion und damit der geringsten Genauigkeit. Um den Einfluss des Diskretisierungsschemas abzuschätzen, wurde die numerische Simulation der Validierung des „K 1“-Kaminofens versuchsweise auch mit dem „High-Resolution“-Verfahren berechnet und die Ergebnisse mit denen des „Upwind“-Verfahrens verglichen.

3.4.2 Untersuchung des Einflusses von Modellen und Modellparametern

Die verschiedenen physikalischen Modelle weisen eine ganze Anzahl von Parametern auf, deren Einfluss auf die Lösung meist wenig vorhersehbar ist. In diesem Abschnitt wird beschrieben, welche Modellparameter zu Testzwecken variiert wurden, um die Änderung der Simulationsergebnisse einschätzen zu können.

3.4.2.1 Nutzung eines Turbulenzmodells sowie Veränderung der turbulenten Prandtl- und Schmidt-Zahl

Für den Energietransport im Fluid und somit für den Wärmeübergang vom Fluid an die Wand ist die Wärmeleitfähigkeit des Fluides eine wesentliche Einflussgröße. Bei einer laminaren Simulation ohne Verwendung eines Turbulenzmodells wird dabei nach Gleichung (3.10) die Wärmeleitfähigkeit des reinen Fluides verwendet.

In einigen Bereichen des Rechengebietes kann angenommen werden, dass dort die Strömung von laminar zu turbulent übergeht und dort möglicherweise die Nutzung eines Turbulenzmodells sinnvoll ist. Zur Abschätzung der Änderung der Ergebnisse bei Berücksichtigung dieses Sachverhaltes wurden die numerischen Simulationen des Kaminofens „K 1“ daher in einem Test mit dem SST-Turbulenzmodell berechnet und die Resultate mit denen ohne Turbulenzmodell verglichen.

Kommt ein Turbulenzmodell zum Einsatz, so wird die Wärmeleitfähigkeit mit Hilfe der turbulenten Prandtl-Zahl Pr_{turb} modifiziert und der turbulente Strömungscharakter somit berücksichtigt. Bei den Simulationen mit Turbulenzmodell muss die turbulente Prandtl-Zahl

daher als zusätzlicher Parameter vorgegeben werden. In Anlehnung an Kays (1994) kann die turbulente Prandtl-Zahl in Abhängigkeit der turbulenten Zähigkeit durch

$$Pr_{\text{turb}} = \frac{1}{0,5882 + 0,228 \cdot \left(\frac{\mu_{\text{turb}}}{\mu}\right) - 0,044 \cdot \left(\frac{\mu_{\text{turb}}}{\mu}\right)^2 \cdot \left[1 - e^{\left(\frac{-5,165}{\left(\frac{\mu_{\text{turb}}}{\mu}\right)}\right)}\right]} \quad (3.69)$$

berechnet werden. Diese Gleichung liefert in Wandnähe (kleines Verhältnis von μ_{turb}/μ) Werte von $Pr_{\text{turb}} = 1,7$. Mit zunehmendem Wandabstand nähern sich die Werte an $Pr_{\text{turb}} = 0,85$. Gleichung (3.69) wurde mit Hilfe benutzerdefinierter Funktionen in ANSYS CFX implementiert. Der dadurch entstehende zirkuläre Bezug (Pr_{turb} hängt von μ_{turb} ab, das wiederum von Pr_{turb} abhängt) wurde mit Hilfe der ANSYS-Benutzerunterstützung aufgelöst.

Neben dieser Funktion wurde auch mit einer konstanten turbulenten Prandtl-Zahl von $Pr_{\text{turb}} = 0,7$ gerechnet und die Ergebnisse wurden miteinander verglichen.

Bei allen Simulationen mit Turbulenzmodell wurde die turbulente Schmidt-Zahl Sc_{turb} gleich der turbulenten Prandtl-Zahl Pr_{turb} gesetzt, um den veränderten Stofftransport aufgrund von Turbulenz zu beachten.

3.4.2.2 Verwendung eines alternativen Reaktionsmechanismus

Alternativ zu der in Abschnitt 3.2.4 beschriebenen Verbrennungskinetik mit dem Ersatzgas „Ersatz5“ wurde in einem Test der Kaminofen „K 1“ mit der Reaktionskinetik nach Jones u. Lindstedt (1988) (siehe Gleichungen (1.10) bis (1.25)) mit dem Ersatzgas „Ersatz1“ nach Tabelle 3.1 berechnet.

3.5 Parameterstudie

3.5.1 Numerische Simulationen zur Optimierung der Geometrie

Auf Basis der Validierung wurde eine Parameterstudie durchgeführt, in welcher der Einfluss verschiedener geometrischer Parameter bei einem Kaminofen mit 6 kW Heizleistung untersucht wurde. Ausgehend vom prinzipiellen Aufbau des bereits experimentell untersuchten Kaminofens „K 1“ wurde eine durch sechs Parameter definierbare Geometrie erstellt, deren Aufbau in Abbildung 3.25 abgebildet ist.

Variiert wurden die Feuerraumhöhe bei konstanter Geometrie des oberen Kaminbaus, der Filterwinkel, die Sekundärluftöffnungsbreite bei konstanter Sekundärluftöffnungsfläche (wie in Abbildung 3.28 gezeigt) sowie die Position der Sekundärluftöffnung über dem Boden. Zur Variation des Filterwinkels existieren zwei Möglichkeiten, da die Umlenkplatte und der Filter zusammen den Feuerraum nach oben begrenzen. Zum einen kann der Filterwinkel durch Vergrößerung der Umlenkplatte und Beibehaltung der Filterfläche verändert werden (siehe Abbildung 3.26). Zum anderen kann der Filterwinkel bei konstanter Umlenkplattengröße modifiziert werden, was eine Veränderung der Filterfläche nach sich zieht (siehe Abbildung 3.27).

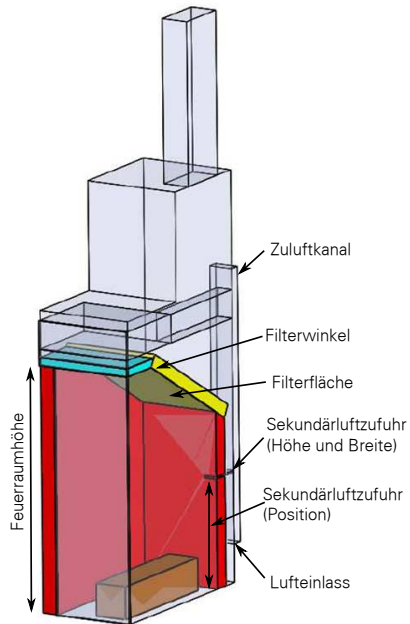


Abbildung 3.25: Aufbau der parametrischen Geometrie (rot = Feuerraumwand, braun = Holzscheit, gelb = Filter, türkis = Umlenkplatte)

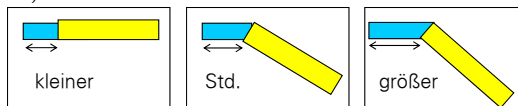


Abbildung 3.26: Variation des Filterwinkels bei konstanter Filterfläche

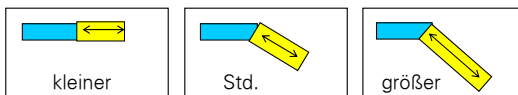


Abbildung 3.27: Variation des Filterwinkels bei variabler Filterfläche, gleichbedeutend mit Variation der Filterfläche

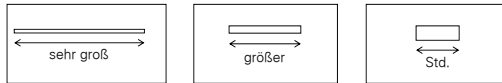


Abbildung 3.28: Variation der Sekundärluftöffnungsbreite

Es wurde ein Standardfall definiert, von dem 12 weitere Fälle abgeleitet wurden, die in Tabelle 3.4 aufgelistet sind. Insgesamt ergaben sich 13 geometrische Varianten (ein Standardfall und für jeden Parameter einen höheren und einen niedrigeren Wert). Die Zellweitenvariation wurde durch veränderte Druckverlustbeiwerte des Filtermaterials entsprechend Gleichung (3.40) realisiert. Bei der geringeren Zellweite ist mit einem Verlustkoeffizienten von $\beta^* = 596 \text{ m}^{-1}$ und mit einer spezifischen Permeabilität von $k = 1,14 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2$ gerechnet worden. Für die größere Zellweite wurden der Verlustkoeffizient mit $\beta^* = 1608 \text{ m}^{-1}$ und die spezifische Permeabilität mit $k = 3,04 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2$ festgelegt.

Tabelle 3.4: Variationen des Standardfalles

Fall 1	Standard	Std.
Fall 2	Feuerraumhöhe	kleiner
Fall 3		größer
Fall 4	Filterwinkel	kleiner
Fall 5		größer
Fall 6	Sekundärluftöffnungsbreite	größer
Fall 7		sehr groß
Fall 8	Position der Sekundärluftzufuhr	niedriger
Fall 9		höher
Fall 10	Filterfläche	kleiner
Fall 11		größer
Fall 12	Zellweite	kleiner
Fall 13		größer

Die Luft wird am unteren Ende des Zuluftkanals, welcher sich auf der Rückseite des Kaminofens befindet, zugeführt. Von ihm zweigt die Sekundärluftzufuhr ab. Der Sekundärluftmassenstrom ergibt sich dadurch in allen Simulationen aus der Druckverteilung und wird nicht als Einlassrandbedingung vorgegeben. Wie in der Validierungssimulation wurde auf eine Primärluftzufuhr (durch den Rost) verzichtet.

Eine weitere Vereinfachung ist die Definition der inneren Stahlwände als dünne Wände mit einem thermischen Widerstand, welcher dem Widerstand eines realen Stahlbleches entspricht.

Aufgrund der vorhandenen Symmetrie wurde nur eine Hälfte des Kaminofens simuliert, bei der Auswertung wurden die nichtspezifischen Größen dann mit dem Faktor zwei multipliziert.

Alle 13 Fälle wurden jeweils für **zwei Konfigurationen** für die Luftzufuhr berechnet. Die erste ist identisch mit der Validierungssimulation, d.h., es wird ein fester Luftmassenstrom (der einem Luftverhältnis von $\lambda_L = 2$ entspricht) zugeführt, was einer **Zwangsbelüftung** gleichkommt.

In der zweiten Konfiguration wird die Luftzufuhr so geregelt, dass an der Einlassöffnung ein bestimmter Unterdruck herrscht, was einer Öffnung mit **freiem Zug** gleicht. Im Kaminofen stellt sich aufgrund der Verbrennung eine höhere Temperatur ein, was zu einem Dichteunterschied zur Umgebung und somit zu einem Unterdruck führt, welcher an der Öffnung durch Luftzufuhr ausgeglichen wird. Der Kaminofen holt sich sozusagen seine benötigte Luft selbst entsprechend der inneren Vorgänge und der Größe der Öffnung der Luftzufuhr.

Der Wert für den Unterdruck am Lufteinlass wurde mit 9,0 Pa festgelegt und entspricht so dem Unterdruck, der beim zwangsbelüfteten Standardfall berechnet wurde. Alle Fälle werden dadurch in Relation zum Standardfall simuliert. Insgesamt ergeben sich somit 26 Simulationen, bestehend aus 13 geometrischen Varianten in jeweils zwei Konfigurationen der Luftzufuhr.

3.5.2 Zusätzliche numerische Simulationen zur Untersuchung von Detailfragen

In zwei weiteren Simulationen, basierend auf dem Standardfall, sollten spezielle Fragestellungen beantwortet werden. Zum einen wurde getestet, wie sich eine Anheizklappe (eine Öffnung in der Umlenkplatte zur Verbesserung des Zuges beim Anheizen) auf die Strömung auswirkt. Darüber hinaus wurde in einer weiteren, separaten Simulation der Frage nachgegangen, ob Öffnungen/Undichtigkeiten in der Feuerraumwand zu einer Strömung in den Feuerraum führen.

Zur Untersuchung der Effekte der Anheizklappe wurde die gesamte Umlenkplatte entfernt beziehungsweise als Fluid definiert und die Simulation mit ansonsten gleichen Bedingungen und den beiden Luftzufuhrkonfigurationen (Zwangsbelüftung und freier Zug) durchgeführt.

Die Frage nach der Strömungsrichtung wurde durch Berechnungen beantwortet, bei denen im hinteren unteren Bereich der Feuerraumwand (siehe Abbildung 3.29) fünf Verbindungslöcher mit je 5 mm Durchmesser zum hinteren Abgasweg eingebracht wurden.

Um den direkten Einfluss der Luftmenge zu analysieren und von dem durch andere Parameter induzierten, indirekten Einfluss zu unterscheiden, wurden zwei weitere

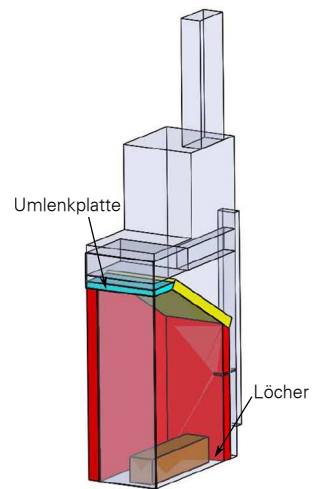


Abbildung 3.29: Position der Umlenkplatte und Löcher (rot = Feuerraumwand, braun = Holzschicht, gelb = Filter)

Simulationen realisiert. Dabei wurde der Standardfall mit Zwangsbelüftung bei den Luftverhältnissen von $\lambda_L = 1,9$ und $\lambda_L = 2,1$ berechnet.

4 Ergebnisse und Diskussion

4.1 Ergebnisse der Abgasanalyse und Abschätzung der Unsicherheiten der Abgasmessungen

Das Messgerät mit der Bezeichnung „HSZG“ ist für Kohlenmonoxidanteile bis 30 Vol – % ausgelegt und hat eine deutlich geringere Genauigkeit im unteren Messbereich. Daher wurde auf eine Bestimmung des Kohlenmonoxidanteils mit diesem Messgerät verzichtet. Somit ergeben sich für die drei Gaskomponenten jeweils zwei Messgeräte, die miteinander verglichen werden können:

- CO: „IBP“ und „TUD“
- CO₂: „IBP“ und „HSZG“
- O₂: „HSZG“ und „TUD“

Aus der Darstellung der Messergebnisse für eine ausgewählte Abbrandperiode können demnach die Messunsicherheiten abgeschätzt werden. Die so ermittelten Abweichungen zwischen den Messsystemen „IBP“ und „TUD“ bezüglich des Kohlenmonoxids betragen im Mittel 0,0144 Vol-% (siehe Abbildung 4.1).

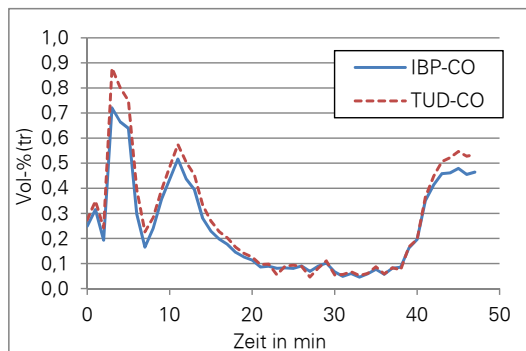


Abbildung 4.1: Vergleich der mit unterschiedlichen Messgeräten aufgenommenen Volumenanteile (in % vom trockenen Abgas) von Kohlenmonoxid für eine ausgewählte Abbrandperiode (Messung: „K 2 (13 % H₂O)“)

Ein Vergleich der Messsysteme „HSZG“ und „TUD“ hinsichtlich des Sauerstoffanteils (siehe Abbildung 4.2) ergibt eine mittlere Abweichung von 1,0 Vol-%.

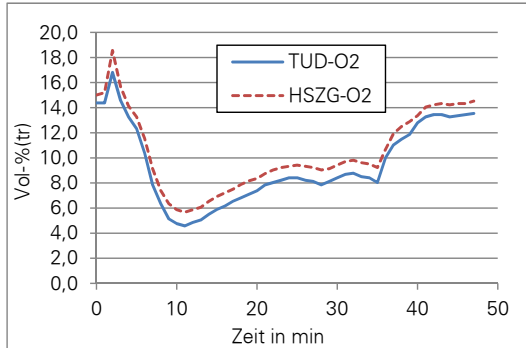


Abbildung 4.2: Vergleich der mit unterschiedlichen Messgeräten aufgenommenen Volumenanteile (in %) im trockenen Abgas von Sauerstoff für eine ausgewählte Abbrandperiode (Messung: „K 2 (13 % H₂O)“)

Die Unterschiede zwischen den gemessenen Kohlendioxidanteilen der Messsysteme „IBP“ und „HSZG“ sind in Abbildung 4.3 dargestellt. Im Mittel ergibt sich eine Abweichung von 0,14 Vol-%.

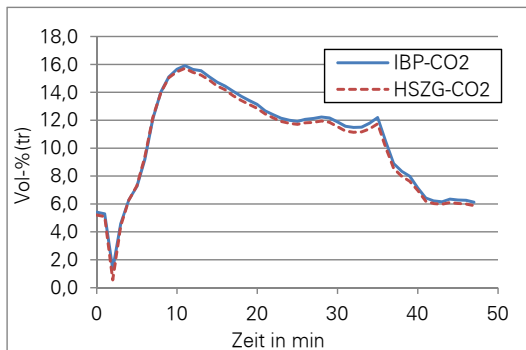


Abbildung 4.3: Vergleich der mit unterschiedlichen Messgeräten aufgenommenen Volumenanteile (in % vom trockenen Abgas) von Kohlendioxid für eine ausgewählte Abbrandperiode (Messung: „K 2 (13 % H₂O)“)

In Abbildung 4.4 ist dieser Messwert im Vergleich zum Kohlendioxidanteil im feuchten Abgas (aus dem Anteil im trockenen Gas nach Abbildung 4.3 berechnet) dargestellt. Es wird deutlich, dass beide Werte einen ähnlichen Verlauf aufweisen. Die theoretischen Verbrennungsrechnungen (siehe Anhang Gleichung (A.1)) bestätigen dies.

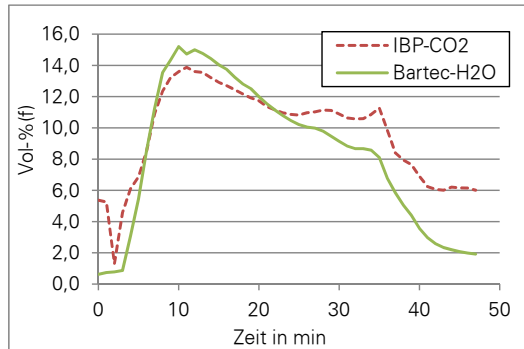


Abbildung 4.4: Vergleich der mit unterschiedlichen Messgeräten aufgenommenen Volumenanteile (in % vom trockenen Abgas) von Kohlendioxid und Wasser für eine ausgewählte Abbrandperiode (Messung: „K 2 (13 % H₂O)“)

Die bisher dargestellten Ergebnisse zeigen die zeitlichen Verläufe für eine bestimmte Messperiode innerhalb eines Messzyklus. Die Messergebnisse der verschiedenen, aufeinanderfolgenden Messperioden wurden auf die gleiche Zeitskala bezogen (vom Start bei null Minuten bis zum Ende von 45-50 Minuten). Für jede Minute wurde der Mittelwert und die Standardabweichung bestimmt, wodurch sich die in Abbildung 4.5 dargestellten Diagramme ergeben. Es zeigt sich, dass die Standardabweichung zwischen verschiedenen Messungen zum gleichen Zeitpunkt (bezüglich der Abbrandperiode) in den ersten 15 Minuten und den letzten 5 Minuten größer als im mittleren Zeitraum (15-40. Minute) ist. Daraus kann geschlossen werden, dass die ersten 15 Minuten und die letzten fünf Minuten einer Abbrandperiode sehr starken Einflüssen unterliegen. Die Ursachen dafür liegen im unterschiedlichen Zündverhalten und dem inhomogenen Brennstoff, der jeweils ein anderes Abbrandverhalten bewirkt.

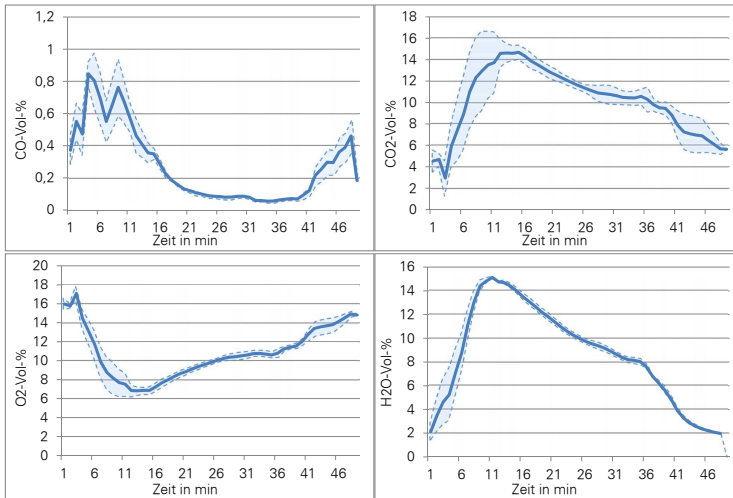


Abbildung 4.5: Mittlerer zeitlicher Verlauf und Bereich der zeitlichen Standardabweichungen für eine Messung bestehend aus vier Abbrandperioden eines Zyklus (Messung: „K 2 (13 % H₂O)“)

Im Bereich von 15–40 Minuten sind die Standardabweichungen der Abgasstoffmengenanteile klein und der Kohlenmonoxidanteil erreicht ein niedriges, stabiles Niveau. Der Abbrand ist in diesem Zeitraum sehr gut und relativ unbeeinflusst von Zündung und Brennstoffinhomogenitäten. Die großen Schwankungen des Kohlenmonoxidanteils in den ersten 10 Minuten der Abbrandperioden sind in vielen Abbrandzyklen festgestellt worden. Sie gehen mit einer sichtbaren Veränderung des Flammenbildes (Erlöschen, Aufflackern, Zündung an anderer Stelle der Scheite, Nachverbrennung der vorangegangenen Auflage) einher und sind nicht systematisch. Auch wenn es bei den in Abbildung 4.5 dargestellten vier Abbrandperioden Ähnlichkeiten bei den Schwankungen gibt, so verdeutlichen die eingezeichneten Bereiche der oberen und unteren Werte (berechnet aus den Standardabweichungen), dass in diesem Zeitraum aus den Messergebnissen keine Systematik abgeleitet werden kann. Nach Erfahrungen aus der praktischen und theoretischen Prozessanalyse sind Mittelwerte nur dann vergleich- oder systematisierbar, wenn sich die Schwankungsbreiten nicht überlappen, was bei den dargestellten Werten im Zeitraum der ersten 10 Minuten aber der Fall ist.

Im zeitlichen Mittel über die verschiedenen Abbrandperioden ergeben sich die in Tabelle 4.1 dargestellten Werte, wobei der Messwert für Wasser im Gegensatz zu den anderen Werten auf das feuchte Abgas bezogen wurde.

Tabelle 4.1: Mittlere Abgaszusammensetzung (Rest Stickstoff) sowie Luftverhältnisse und deren Standardabweichung für die Messungen („-“ bedeutet keine Messung durchgeführt)

Bezeichnung der Messung	Stoffmengenanteile in %				Luftverhältnis
	CO(tr)	CO ₂ (tr)	O ₂ (tr)	H ₂ O(feucht)	
„K 1“ (10% H ₂ O)	0,15±0,12	9,56±3,3	9,49±3,03	-	2,13±0,18
„K 1“ (10% H ₂ O, abgeklebt)	0,12±0,08	8,8±3,51	11±3,94	-	2,31±0,09
„K 1“ (13% H ₂ O)	0,12±0,09	8,4±2,83	12,29±3,11	7,7±2,96	2,43±0,29
„K 2“ (13% H ₂ O)	0,16±0,16	9,97±3,03	10,8±2,77	6,88±4,6	2,03±0,01
„K 2“ (17% H ₂ O)	0,24±0,22	9,75±3,3	10,39±2,95	9,05±4	2,08±0,13

4.2 Bestimmung des Verlaufes der Brennstoffmasse

4.2.1 Resultate der Online-Messung der Massenabnahme

Die Veränderungen der Masse wurden online verfolgt. Bezugspunkt bildete die Masse unmittelbar vor Beginn der Messung. Ausgehend von dieser Vorgehensweise ergab sich der in Abbildung 4.6 gezeigte Massenverlauf. Die Gesamtmasse nimmt dabei kontinuierlich zu, was durch einen unvollständigen Abbrand erklärbar ist. Die neue Auflage wird unter den Messbedingungen schon ca. 10-20 Minuten vor dem kompletten Abbrand eingebracht.

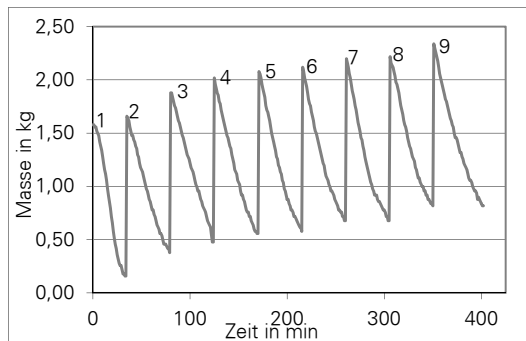


Abbildung 4.6: Zeitlicher Verlauf der gesamten Brennstoffmasse

Die einzelnen Abbrandperioden (unter Vernachlässigung der ersten 3 Perioden, welche das Anheizverhalten widerspiegeln) können auch auf die jeweilige Brennstoffmasse und Zeit nach der Auflage bezogen dargestellt werden, wodurch sich der Verlauf in Abbildung 4.7 ergibt.

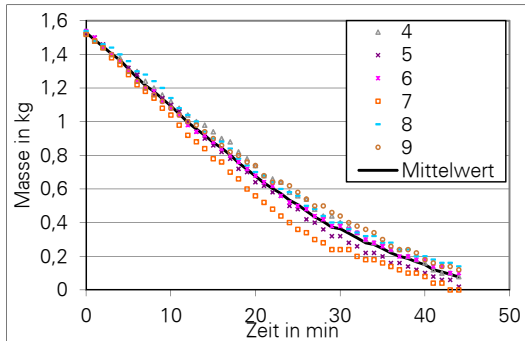


Abbildung 4.7: Abnahme der Brennstoffmasse bei verschiedenen Abbrandperioden

Aus Abbildung 4.7 geht hervor, dass im Mittel am Ende der Abbrandperioden noch eine Brennstoffmasse von bis zu 140 g vorhanden ist. Stellt man den theoretisch zu erwartenden Wert anhand der Brennstoffanalyse den experimentellen Befunden gegenüber, ergibt sich folgendes Bild. Theoretisch sollte sich pro Periode eine Aschemasse von 5 g-10 g ergeben, so dass am Ende der kompletten Messung und nach Abkühlung des Kaminofens also die Periodenanzahl eines Zyklus multipliziert mit 5 g-10 g Asche übrig bleiben. Die Perioden 5 und 7 zeigen allerdings einen Abbrand ohne Ascherückstände nach 45 Minuten und repräsentieren somit die minimale Aschemasse. Bei den Perioden 8 und 9 hingegen blieb am meisten Asche von der Auflage übrig.

Die Messergebnisse lassen den Schluss zu, dass das Holz nicht immer vollständig abbrennt und im Mittel noch 77 g (beziehungsweise ca. 5 % der Ausgangsmasse) Brennstoff übrig bleiben. Das Aschebett ohne nachweisbare brennbare Bestandteile ist Resultat der Nachverbrennung nach dem Ende der Messung.

Dabei ergab sich die Problematik, dass die oben dargestellte Massenabnahme aus dem Abbrand des gerade aufgelegten Brennstoffes und dem Abbrand des Restes der vorangegangenen Brennstoffauflage resultiert. Während einer Abbrandperiode verbrennt ein Teil der frischen Auflage und ein Rest der vorherigen Auflage.

Zur Ermittlung einer Modellfunktion für den realen zeitlichen Verlauf einer Brennstoffauflage muss dieser Sachverhalt berücksichtigt werden. Abbildung 4.8 verdeutlicht die Zusammenhänge zwischen der gesuchten Modellfunktion, der Massenabnahme einer Brennstoffauflage und den Messwerten. Folgende Bedingungen müssen demnach erfüllt werden:

- Die Modellfunktion muss nach langer Zeit einen Wert nahe der Aschemasse anstreben.
- Wird der Reststoff R zur Modellfunktion addiert (siehe Abbildung 4.8), ergeben sich die Messwerte.
- Der Reststoff ergibt sich aus der gesuchten Modellfunktion für Zeiten größer 45 Minuten, d.h., die Reststofffunktion und die gesuchte Modellfunktion sind identisch und nur

zueinander entlang der X-Achse verschoben. Die Differenz zwischen Messdaten und gesuchter Modellfunktion entspricht dem abnehmenden Reststoffmassenstrom.

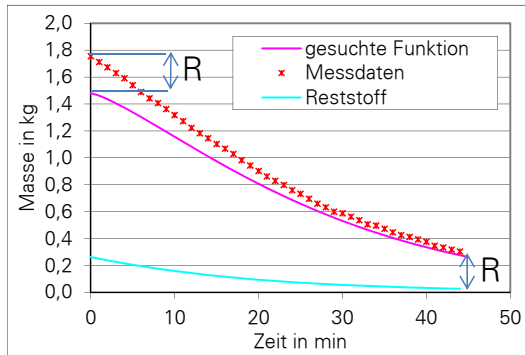


Abbildung 4.8: Erklärende Darstellung zur gesuchten Modellfunktion der Massenabnahme

Diese Bedingungen können mathematisch formuliert und in einer anschließenden Regressionsanalyse genutzt werden, um die Messdaten mit Hilfe einer geeigneten Modellfunktion anzupassen, wobei davon ausgegangen werden muss, dass die Scheitgeometrie immer konstant bleibt. In einer vorgeschalteten Strukturanalyse wurde der Ansatz

$$m(t) = \frac{a}{\exp(b \cdot (t^d + c))} + e \quad (4.1)$$

als dafür am besten geeignet ermittelt. In Gleichung (4.1) sind a, b, c, d, e die Modellkoeffizienten, wobei e die Aschemasse repräsentiert und mit 0,005 kg festgelegt wurde. t ist die Zeit in Minuten. Eine Anpassung an die Messdaten (Mittelwerte) erfolgte durch Variation der Modellkoeffizienten a bis d und des konstanten Wertes für den Reststoff R mittels der Methode der kleinsten Fehlerquadrate.

Das Ergebnis der Anpassung der Modellfunktion für die mittlere Massenabnahme wird in Abbildung 4.9 gezeigt. Die sehr gute Übereinstimmung der Messdaten mit der Modellfunktion inklusive des Reststoffes zeigt die gute Eignung der gewählten Ansatzfunktion nach Gleichung (4.1).

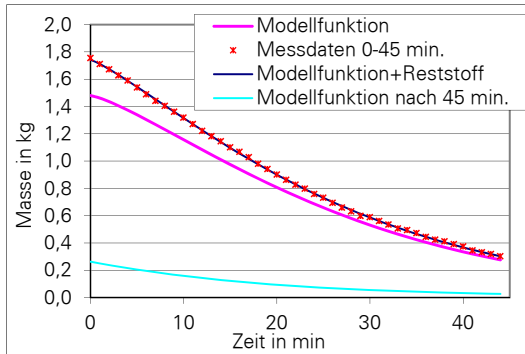


Abbildung 4.9: Messwerte und ermittelte Modellfunktion der Massenabnahme

Zur Abschätzung der Unsicherheiten wurde die Anpassung auch für die minimalen und maximalen Massen (Periode 7 und 8) durchgeführt. Die ermittelten Koeffizienten sind in Tabelle 4.2 zusammengefasst.

Tabelle 4.2: Koeffizienten für die Modellfunktion der Massenabnahme nach Gleichung (4.1)

Koeffizient	minimal	mittel	maximal
a	1,6241	1,5238	1,5291
b	0,0174	0,0125	0,0132
c	2,5843	2,5871	2,5873
d	1,2594	1,2974	1,2670
e	0,0050	0,0050	0,0050
R	0,2314	0,2244	0,2353

Alle drei Modelle sind vergleichend in Abbildung 4.10 dargestellt, wobei die Anfangsmasse von 1,53 kg bis 1,62 kg variiert (Abweichung von 5,4 %).

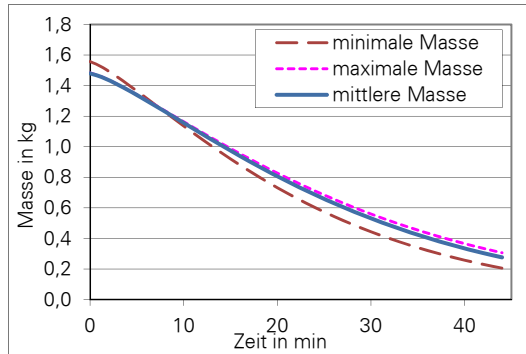


Abbildung 4.10: Modellfunktionen der mittleren, minimalen und maximalen Massenabnahme

4.2.2 Resultate der Offline-Messung der Massenabnahme

Analog zur Online-Messung konnte auch für die Offline-Messung festgestellt werden, dass zum Ende (nach 50 Minuten) eine Restmasse von 150 g – 200 g verblieb – obwohl mit größtmöglicher Sorgfalt nur die zur letzten Abbrandperiode eines Zyklus zugehörigen Brennstoffreste (und tendenziell eher zu wenig) entnommen wurden.

Diese Messergebnisse können direkt mit den im vorherigen Abschnitt ermittelten Modellfunktionen für die Massenabnahme verglichen werden (siehe Abbildung 4.11). Aus diesem Diagramm lässt sich eine sehr gute (gemessen an den Messunsicherheiten) Übereinstimmung der Offline-Messung mit den Modellen erkennen und es kann bestätigt werden, dass beide Kaminöfen annähernd gleiche zeitliche Massenabnahmen aufweisen.

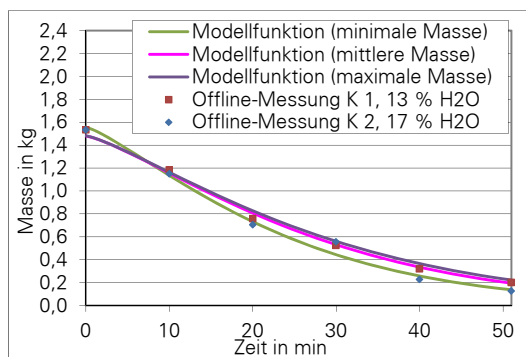


Abbildung 4.11: Vergleich der Offline-Messung mit den ermittelten Modellfunktionen

Die angegebene Gleichung (4.1), zusammen mit den Koeffizienten aus Tabelle 4.2, liefert demnach eine Abschätzung der Abbrandkinetik des Holzes im Kaminofen unter den Prüfbedingungen.

Alle entnommenen Proben wurden anschließend hinsichtlich ihrer Zusammensetzung (Wasser, Asche und Elemente C, H, O, N, S) untersucht, wobei die entnommene Holzmasse gemahlen und davon eine repräsentative Probe untersucht wurde. Der Massenanteil Schwefel in allen Proben war kleiner 0,01 Masse – % und wurde daher vernachlässigt.

Die Ergebnisse dieser Elementaranalysen sind in Abbildung 4.12 dargestellt (aschefrei). Die absoluten normierten Komponentenmassen wurden dabei aus den Massenanteilen und der normierten Gesamtmasse berechnet, so dass sie in der Summe die gesamte normierte Masse ergeben.

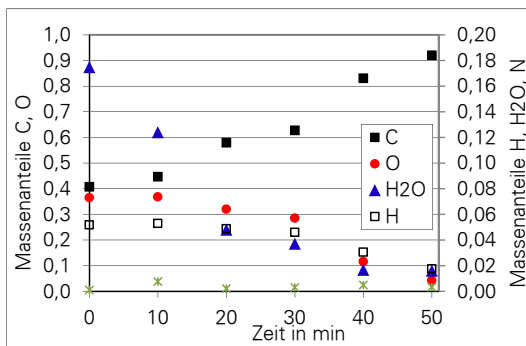


Abbildung 4.12: Zusammensetzung des Holzscheites zu verschiedenen Zeiten

Es wird deutlich, dass zum Ende des Abbrands die Komponente C den Hauptbestandteil (89 Masse – %) des Holzes stellt (6 % O, 3 % H, 2 % Asche). Der Massenanteil Stickstoff bleibt während des gesamten Abbrands unter 1 % (0,1 %...0,8 %) und wird daher für die weiteren Betrachtungen vernachlässigt.

Zusammen mit der Abbrandkinetik kann ermittelt werden, wie viel Masse der einzelnen Elemente in den zehnminütigen Zeitintervallen zwischen den Messungen umgewandelt beziehungsweise verbrannt wurde. Legt man eine Verbrennungsrechnung zu Grunde, so kann aus diesen Daten die mittlere Abgaszusammensetzung in den jeweiligen 10 Minuten berechnet werden. Da die zugeführte Luft nicht gemessen werden konnte, muss dabei das Luftverhältnis aus den Messdaten für Kohlendioxid bestimmt werden (siehe Anhang), so dass der berechnete Kohlendioxidanteil immer gleich dem gemessenen ist.

Die so bestimmte theoretische Abgaszusammensetzung ist zusammen mit der gemessenen in Abbildung 4.13 gezeigt, wobei Kohlendioxid und Sauerstoff im trockenen Abgas gemessen wurden und daher auch mit den trockenen Anteilen verglichen werden müssen. Erkennbar ist, dass für den Wasseranteil größere Unterschiede als für den Sauerstoffanteil auftreten.

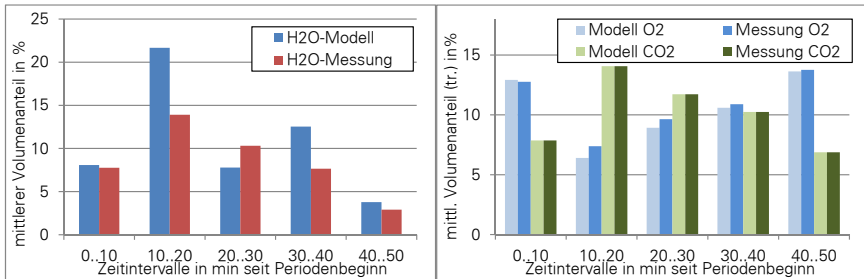


Abbildung 4.13: Vergleich der gemessenen (mit „Messung“ bezeichnet) und aus Messdaten bestimmten mittleren Abgaszusammensetzung (Bezeichnung = „Modell“)

Anschließend wurde der Fehler zwischen der Abgasmessung und Berechnung minimiert, indem eine gewisse Abweichung bei der Messung der Elementarzusammensetzung zugelassen wurde (unter der Berücksichtigung der Massenerhaltung). Eine Minimierung der Fehlerquadratsumme ergab die in Abbildung 4.14 dargestellten Abgas- und Elementarzusammensetzungen für Messung und Berechnung aus Messdaten.

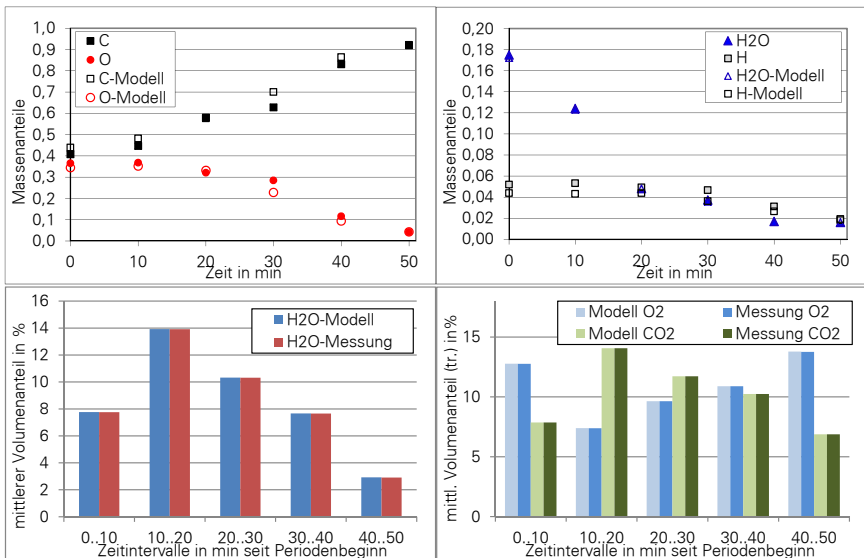


Abbildung 4.14: Vergleich der gemessenen (bezeichnet als „Messung“) und durch Fehlerminimierung aus Messdaten berechneten mittleren Abgaszusammensetzung (Bezeichnung = „Modell“)

Auf Basis dieser Berechnungen ist es möglich, die Zusammensetzung und somit die Summenformel für den umgewandelten Brennstoff im jeweiligen Zeitintervall abzuschätzen. In Tabelle 4.3 sind die Summenformeln (auf der Basis von sechs C-Atomen) für den umgewandelten und nicht umgewandelten Brennstoff dargestellt. Der Restbrennstoff besitzt dabei zum Zeitpunkt null eine Summenformel, welche der Ausgangszusammensetzung des eingesetzten Holzes entspricht (fett gedruckt im rechten Bereich von Tabelle 4.3). Die Summe des während des gesamten Messzyklus umgewandelten Brennstoffes entspricht dem Mittelwert über den Zeitraum 0...50 Minuten (fett gedruckt im linken Bereich der Tabelle 4.3). Diese Summe sollte (wenn nach 50 Minuten fast nur noch Kohlenstoff im Restbrennstoff verbleibt) der Summenformel des Ausgangsstoffes entsprechen, was nach Tabelle 4.3 als recht gut wiedergegeben angesehen werden kann.

Tabelle 4.3: Summenformel für umgewandelten Brennstoff (links) und verbliebenen Restbrennstoff

Zeitintervall in Minuten	C	H	O	Zeitintervall in Minuten	C	H	O
0..10	6	11,9	5,5	0..10	6	11,8	6,2
10..20	6	22,7	10,8	10..20	6	13,2	7,7
20..30	6	7,6	3,3	20..30	6	11,6	6,6
30..40	6	15,6	7,6	30..40	6	9,6	5,2
40..50	6	5,1	1,5	40..50	6	5,0	2,1
0..50	6	12,6	5,7	0..50	6	10,2	5,6

Die Anpassung an Messdaten kann auch unter Zuhilfenahme der minütlich ermittelten Abgaszusammensetzung in Zusammenhang mit Modellfunktionen für die Brennstoffzusammensetzung geschehen. Als geeignete Modellfunktionen für den Massenanteil ergaben sich dabei Polynome dritten Grades (für ξ_C , ξ_H , ξ_O) und fünften Grades (für ξ_{H_2O}). Die Bedingung, dass die Massenanteile in der Summe eins ergeben, wurde dadurch realisiert, dass sich die Massenanteile aus dem Quotienten aus dem einzelnen Polynom und der Summe aller Modellfunktionen (siehe Gleichung (4.2)) berechnen. Dadurch ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
 \xi_C(t) &= \frac{a_C + b_C \cdot t + c_C \cdot t^2}{\xi_C(t) + \xi_H(t) + \xi_O(t) + \xi_{H_2O}(t)} \\
 \xi_H(t) &= \frac{a_H + b_H \cdot t + c_H \cdot t^2}{\xi_C(t) + \xi_H(t) + \xi_O(t) + \xi_{H_2O}(t)} \\
 \xi_O(t) &= \frac{a_O + b_O \cdot t + c_O \cdot t^2}{\xi_C(t) + \xi_H(t) + \xi_O(t) + \xi_{H_2O}(t)} \\
 \xi_{H_2O}(t) &= \frac{a_{H_2O} + b_{H_2O} \cdot t + c_{H_2O} \cdot t^2 + d_{H_2O} \cdot t^4 + e_{H_2O} \cdot t^5}{\xi_C(t) + \xi_H(t) + \xi_O(t) + \xi_{H_2O}(t)}. \quad (4.2)
 \end{aligned}$$

Die der Anpassung zu Grunde liegenden Luftverhältnisse ergeben sich aus dem gemessenen Kohlendioxidanteil im Abgas und sind in Abbildung 4.15 dargestellt. Die durch Minimierung der Fehlerquadrate angepassten Koeffizienten a-f sind in Tabelle 4.4 aufgelistet.

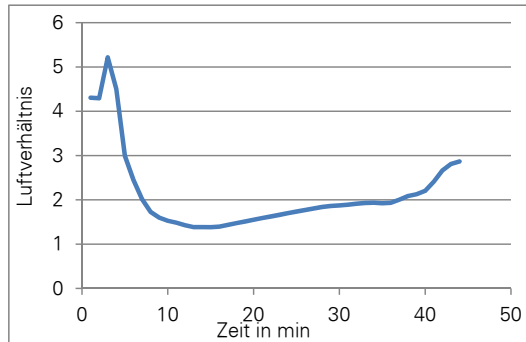


Abbildung 4.15: Zeitlicher Verlauf des Luftverhältnisses

Tabelle 4.4: Koeffizienten für die Modellfunktionen der Massenanteile $\xi_C(t)$, $\xi_H(t)$, $\xi_O(t)$ und $\xi_{H_2O}(t)$ mit t in Minuten

	$\xi_{H_2O}(t)$	$\xi_C(t)$	$\xi_H(t)$	$\xi_O(t)$
a	1,750E-01	4,070E-01	5,200E-02	3,650E-01
b	2,500E-02	8,450E-02	1,072E-02	7,600E-02
c	-1,065E-03	9,200E-04	-1,700E-04	-1,500E-03
d	6,000E-06			
e	7,800E-08			

Mit den so definierten Modellfunktionen (zusammen mit der Funktion für die Massenabnahme nach Gleichung (4.1)) lassen sich die Verläufe für die mittlere Zusammensetzung des Holzes abschätzen. Unter Zuhilfenahme einer Verbrennungsrechnung können zusätzlich die Anteile von Wasser, Sauerstoff und Kohlendioxid im Abgas überschlagen werden (siehe Abbildung 4.16).

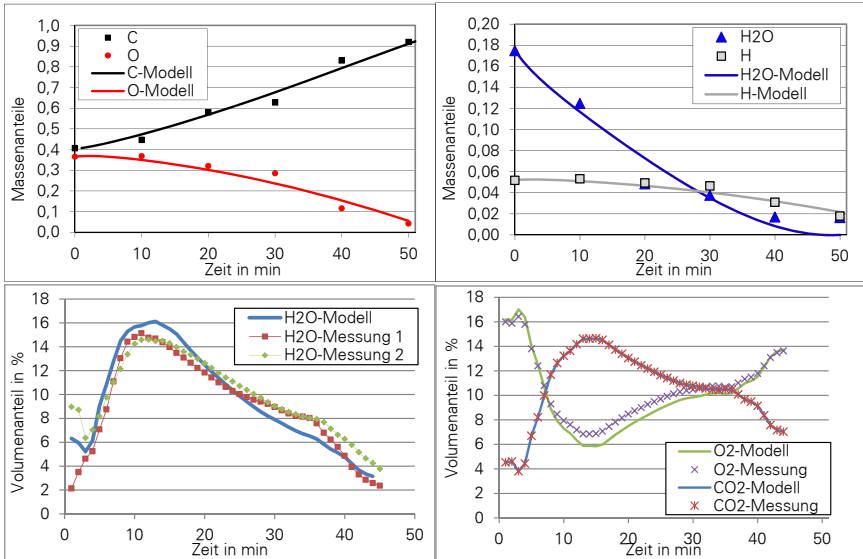


Abbildung 4.16: Vergleich der gemessenen (Messung) und berechneten mittleren Abgas- und Elementarzusammensetzung (Modell) bei Anpassung durch Fehlerminimierung

Interessant an diesem Ergebnis ist die langsame Abnahme des Wasseranteils im Holz. Dies wurde im Vorfeld der Untersuchungen nicht erwartet. Erklärbar wird dieser Fakt durch die großen Scheitdimensionen, die die Transportprozesse im Scheit behindern. Solange lokal im Scheit Wasserflüssigkeit vorliegt, wird die Temperatur an diesen Orten nicht wesentlich größer als die dort herrschende Sättigungstemperatur (unter Normaldruck 100 ° C) werden. Die chemischen Reaktionen im Scheit werden somit gebremst und es stellt sich eine stark verminderte Makrokinetik ein.

4.3 Auswertung der Temperaturmessungen

Die Temperaturen an den Außenoberflächen ($t_{\text{au_...}}$) unterscheiden sich sehr stark voneinander (von 80 ° C bis 250 ° C). Aus diesem Grund werden die Temperaturmessergebnisse in den Tabellen 4.5 bis 4.7 für drei Messebenen (Oben, Unten, Mitte) einzeln angegeben. Alle anderen Messwerte werden (zusammen mit der mittleren Temperatur) gemittelt und gemeinsam in Tabelle 4.8 aufgeführt. Dabei werden die Temperaturen der Außenoberflächen, des Feuerraumes sowie die oberen und unteren Filtertemperaturen zusätzlich örtlich gemittelt.

Tabelle 4.5: Mittlere Temperaturen der Außenoberflächen und deren Standardabweichung in der oberen Ebene für die Messungen („-“, bedeutet Sensordefekt/Ausfall des Messpunktes)

Bezeichnung der Messung	T _{au_R1} in ° C	T _{au_L1} in ° C	T _{au_H1} in ° C	T _{au_H4} in ° C	T _{au_V1} in ° C	T _{au_V2} in ° C
K 1 (10% H ₂ O)	154±8	158±10	137±6	143±7	110±4	104±4
K 1 (10% H ₂ O, abgeklebt)	180±14	-	-	154±8	115±7	151±33
K 1 (13% H ₂ O)	149±15	152±10	136±12	130±8	80±10	82±8
K 2 (13% H ₂ O)	183±12	193±15	108±7	97±7	251±18	240±16
K 2 (17% H ₂ O)	189±14	190±13	108±8	97±7	247±16	246±19

Tabelle 4.6: Mittlere Temperaturen der Außenoberflächen und deren Standardabweichung in der mittleren Ebene für die Messungen („-“, bedeutet Sensordefekt/Ausfall des Messpunktes)

Bezeichnung der Messung	T _{au_R2} in ° C	T _{au_L2} in ° C	T _{au_H2} in ° C	T _{au_H5} in ° C	T _{au_S1} in ° C	T _{au_S2} in ° C
K 1 (10% H ₂ O)	223±18	270±34	163±9	215±17	290±35	282±36
K 1 (10% H ₂ O, abgeklebt)	257±25	-	-	231±18	123±10	166±18
K 1 (13% H ₂ O)	232±35	242±26	172±23	188±17	264±37	271±34
K 2 (13% H ₂ O)	194±7	193±7	100±2	101±3	337±36	314±37
K 2 (17% H ₂ O)	199±8	186±6	100±3	98±3	331±40	313±40

Tabelle 4.7: Mittlere Temperaturen der Außenoberflächen und deren Standardabweichung in der unteren Ebene für die Messungen

Bez. der Messung	T _{au_R3} in ° C	T _{au_L3} in ° C	T _{au_H3} in ° C	T _{au_H6} in ° C
K 1 (10% H ₂ O)	181±5	171±5	121±5	141±5
K 1 (10% H ₂ O, abgeklebt)	172±15	165±12	118±11	135±10
K 1 (13% H ₂ O)	162±18	154±15	104±12	120±12
K 2 (13% H ₂ O)	194±5	200±6	69±1	71±1
K 2 (17% H ₂ O)	198±7	191±7	68±1	69±1

Tabelle 4.5, Tabelle 4.6 und Tabelle 4.7 geben die Temperaturen im oberen, unteren und mittleren Bereich der Außenfläche wieder. Gerade im Fall mit abgeklebter Scheibe ist die Temperatur auf der Scheibe um ca. 150 K geringer, da die Messstellen nicht mehr dem direkten Strahlungseinfluss unterliegen. Bei der Abgastemperatur (und somit im Wirkungsgrad, siehe nächster Abschnitt) und bei den Temperaturen der Außenoberflächen zeigt sich bei abgeklebter Scheibe eine Erhöhung um 10 – 30 K, was so nicht erwartet wurde. Der Einfluss der Glasscheibe auf den Gesamtwirkungsgrad scheint demnach gering zu sein.

Tabelle 4.8: Mittlere Temperaturen und deren Standardabweichung für die Messungen

Bezeichnung der Messung	Abgas in ° C	Feuerraum in ° C	Außenoberflächen in ° C	Filter (unten) in ° C	Filter (oben) in ° C
K 1 (10% H ₂ O)	199±10	461±57	179±61	538±155	400±58
K 1 (10% H ₂ O, abgeklebt)	218±12	518±58	164±45	568±84	451±62
K 1 (13% H ₂ O)	192±10	432±55	165±62	491±86	390±57
K 2 (13% H ₂ O)	277±23	474±48	178±81	530±76	439±55
K 2 (17% H ₂ O)	264±23	479±62	177±81	529±86	439±61

Aus Tabelle 4.8 ergibt sich, dass der Kaminofen vom Typ „K 2“ prinzipiell höhere Abgastemperaturen aufweist. Die Filtertemperaturen im unteren (dem Feuerraum zugewandten) Teil sind immer zwischen 100 ° C und 130 ° C größer als die im oberen (dem Abgasweg zugewandten) Bereich. Die großen Standardabweichungen bei den örtlich und zeitlich gemittelten Temperaturen (alle in Tabelle 4.8 außer der Abgastemperatur) zeugen von der großen Schwankungsbreite der Messergebnisse aufgrund der instationären Betriebsweise und der inhomogenen Wärmeströme. Jedes einfache Bilanzmodell unter der Annahme örtlich gleichverteilter Temperaturen unterliegt demnach großen Unsicherheiten.

Vergleiche mit Berechnungsergebnissen werden durch diese großen Standardabweichungen ebenfalls erschwert, beziehungsweise müssen unter diesem Aspekt geführt werden.

4.4 Ergebnisse der Bilanzierung der Stoff- und Energieströme für die Messungen

Zur Bewertung der zwei verschiedenen Kaminöfen sind in Tabelle 4.9 die wesentlichen Parameter dieser Kaminöfen angegeben, welche nach den im Anhang A hergeleiteten Gleichungen für den Abgasmassenstrom, die Abgaszusammensetzung sowie die Enthalpie des Abgases ausgewertet wurden. Die Auswertung orientiert sich dabei an den normierten Vorschriften der DIN EN 13240 und weist einen Unterschied von weniger als 0,5 % gegenüber dieser auf.

Die im vorherigen Abschnitt aufgezeigten großen Schwankungen der Temperaturen kommen in dieser Tabelle nicht zum Ausdruck, da die Heizleistung des Kaminofens als bilanzschließende Größe aus der Brennstoffleistung und dem im Abgas enthaltenen Energie(verlust)strom nach Gleichung (4.3) berechnet wird.

$$\dot{Q} = \dot{H}_{\text{Brennstoff}} - \dot{H}_{\text{Abgas}} \quad (4.3)$$

Für die Brennstoffleistung wurde der Heizwert des Holzes mit dem entsprechenden Wasseranteil (siehe Messung Nr. 2 in Tabelle 2.2) verwendet. Die im Abgas enthaltene Energie wurde mittels der in Anhang A.5 und A.7 angegebenen Gleichungen bestimmt, nach der die Heizleistung die Energiebilanz schließende Größe darstellt. Die ebenfalls im Anhang angegebenen Gleichungen nach DIN EN 13240 sind als zusätzliche Referenz aufgeführt und wurden zu Vergleichszwecken verwendet.

Tabelle 4.9: Mittlere energetische und stoffliche Kennwerte und deren Standardabweichung für die Messungen

Bezeichnung der Messung	Wirkungsgrad in %	Heizleistung in kW	Holzmassenstrom in kg/h	Holzaufgabe in kg	Brennstoffleistung in kW
K 1 (10% H ₂ O)	86,1±1	7,9±0,1	2,02±0,01	1,52±0,01	9,2±0,1
K 1 (10% H ₂ O, abgeklebt)	83,4±0,08	7,5±0,2	2±0,05	1,53±0	9±0,2
K 1 (13% H ₂ O)	84,7±1,3	7,2±0,6	1,97±0,14	1,53±0,01	8,5±0,6
K 2 (13% H ₂ O)	80,1±0,2	6,6±0,1	1,91±0,01	1,52±0,01	8,2±0,1
K 2 (17% H ₂ O)	80,7±0,6	6,5±0,6	1,96±0,16	1,53±0,01	8±0,6

Erkennbar wird, dass die Wirkungsgrade und die Brennstoffleistungen des Kaminofens „K 2“ geringer als die von „K 1“ sind. Das liegt zum einen (bei „K 2 (13% H₂O)“) an längeren Abbranddauern und damit verbundenem geringeren Holzmassenstrom, zum anderen (bei „K 2 (17% H₂O)“) an dem geringen Heizwert, bedingt durch einen hohen Wasseranteil. Anhand dieses Beispiels wird deutlich, wie groß der Einfluss der Abbranddauer ist. Schon eine um 3 Minuten höhere Abbranddauer (von 45 Minuten auf 48 Minuten) bedeutet bei konstanter Auflagemasse eine Senkung des Brennstoffmassenstromes um 6,6 % (3/45*100) und damit auch eine Verringerung der Brennstoffleistung um 6,6 % beziehungsweise 560 W.

Um die Energiebilanz auf ihre Plausibilität zu testen, wurde aus der mittleren Temperatur der Außenoberflächen ein Wärmestrom berechnet, der mit der Heizleistung nach Tabelle 4.9 übereinstimmen sollte. Zu diesem Zweck wurde ein mittlerer Wärmeübergangskoeffizient an der Außenoberfläche berechnet, welcher Konvektion und thermische Strahlung berücksichtigt. In Tabelle 4.10 sind die berechneten Heizleistungen dargestellt. Es wird deutlich, dass große Unterschiede zwischen der nach DIN-Verfahren berechneten Heizleistung und der aus der Temperatur der Außenoberflächen bestimmten mittleren Heizleistung existieren. Klar wird auch, dass die großen zeitlichen und örtlichen Temperaturschwankungen zu einer sehr großen

Schwankungsbreite bei der aus den Temperaturen der Außenoberflächen berechneten Heizleistung führen. Schon eine Erhöhung der mittleren Temperatur der Außenoberflächen um 15 K bewirkt ein Anstieg der Heizleistung um 1 kW.

Tabelle 4.10: Aus Temperaturen der Außenoberflächen berechnete Heizleistungen im Vergleich zu ermittelten Heizleistungen gemäß vereinfachter Verbrennungsrechnung

Bezeichnung der Messung	Heizleistung in kW (aus Bilanz)	Heizleistung in kW (aus Außentemp.)	Außenoberfläche in m ²
K 1 (10% H ₂ O)	7,9±0,1	6,7±3,5	2,24
K 1 (10% H ₂ O, abgeklebt)	7,5±0,2	5,7±3,1	2,24
K 1 (13% H ₂ O)	7,2±0,6	5,7±3,5	2,24
K 2 (13% H ₂ O)	6,6±0,1	4,4±2,9	1,50
K 2 (17% H ₂ O)	6,5±0,6	4,4±2,9	1,50

Die Diskrepanz zwischen den beiden Heizleistungen ist dadurch erklärbar, da die Temperaturmessstellen nicht die komplette Außenoberfläche abdecken und örtliche Minima und Maxima somit nicht erfasst werden können.

An dieser Stelle soll noch einmal darauf hingewiesen werden, dass beide Kaminöfen ohne ihre äußere Verkleidung untersucht wurden und die hohen Temperaturen auf den Außenoberflächen für den reinen Kamineinsatz gelten. Fertig installierte Kaminöfen besitzen eine Außenverkleidung, die zwar den Wärmestrom mindert, gleichzeitig aber dadurch hohe Temperaturen an den Außenoberflächen unterbindet.

4.5 Ergebnisse der Verbrennungsrechnungen

Mit dem in Abschnitt 3.1.1 beschriebenen einfachen Verbrennungsmodell wurden die beiden Kaminöfen berechnet. Dabei wurde von dem in Tabelle 2.1 (Messung Nr.2) charakterisierten Brennstoff ausgegangen und mit dem experimentell ermittelten Luftverhältnis nach Tabelle 4.1 gerechnet. Die einfachen Verbrennungsrechnungen dienen dem Vergleich mit der numerischen Simulation und können für eine schnelle Abschätzung der Einflussgrößen genutzt werden. Darüber hinaus wurden sie für eine Validierung der Messdaten herangezogen. In Tabelle 4.11 sind die Eingabedaten für die beiden Kaminöfen dargestellt.

Tabelle 4.11: Eingabedaten für vereinfachte Verbrennungsrechnung mit Holz nach Tabelle 2.2 (Messung Nr.2), Brennstoffstrom nach Tabelle 4.9 und Luftverhältnis nach Tabelle 4.1

	K 1 (13% H ₂ O)	K 2 (13% H ₂ O)
Massenstrom Brennstoff $\dot{m}_{\text{Brennstoff}}$ in kg/h	1,97	1,91
Heizwert Brennstoff H_i in MJ/kg	15,50	15,50
abs. Heizwert Brennstoff \dot{H}_i in kW	8,48	8,22
mittlere Schamotteschicht in m	0,05	0,05
Außenoberfläche A_{au} in m ²	1,757	1,5
Massenanteil C ξ_C in kg/kg	0,4334	0,4334
Massenanteil H ξ_H in kg/kg	0,0535	0,0535
Massenanteil O ξ_O in kg/kg	0,3786	0,3786
Massenanteil N ξ_N in kg/kg	0,0008	0,0008
Massenanteil Wasser ξ_W in kg/kg	0,1337	0,1337
Luftverhältnis	2,43	2,03

Aus den in Tabelle 4.12 dargestellten Ergebnissen kann entnommen werden, dass sich die Wirkungsgrade der beiden Kaminöfen nur um einen Prozentpunkt voneinander unterscheiden und der Kaminofen „K 2 (13% H₂O)“ einen größeren Wirkungsgrad aufweist. Dieses Resultat steht im Widerspruch zu den in Tabelle 4.9 gezeigten Werten, die auf einen größeren Wirkungsgradunterschied (fast fünf Prozentpunkte) zwischen beiden Kaminöfen hindeuten, wobei der Kaminofen „K 1 (13% H₂O)“ einen höheren Wert aufweist.

Tabelle 4.12: Ergebnisse der einfachen Verbrennungsrechnung

	„K 2“ (13% H ₂ O)	„K 2“ (13% H ₂ O)
Massenstrom Luft $\dot{m}_{\text{Brennstoff}}$ in kg/s	0,0068536	0,005813
Enthalpie Brennstoff $h_{\text{Brennstoff}}$ in MJ/kg	-6,91	-6,91
Enthalpiestrom Brennstoff $\dot{H}_{\text{Brennstoff}}$ in kW	-3,78	-3,67
Temperatur Außenoberfläche ϑ_{au} in °C	209,64	227,27
WÜ-koeffizient konvektiv $\alpha_{\text{au, konv}}$ in W/(m ² ·K)	7	7
äq. WÜ-koeffizient Strahlung $\alpha_{\text{au, Strahlung}}$ in W/(m ² ·K)	14,04	15,13
WÜ-koeffizient gesamt $\alpha_{\text{au, gesamt}}$ in W/(m ² ·K)	21,04	22,13
$\dot{m}_{\text{Luft}}/\dot{m}_{\text{Brennstoff}}$	12,52	10,46
$\dot{m}_{\text{Abgas}}/\dot{m}_{\text{Brennstoff}}$	13,52	11,46
Stoffmengenanteil CO ₂ (feucht) $\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, f}}$ in %	7,73	9,13
Stoffmengenanteil H ₂ O (feucht) $\psi_{\text{H}_2\text{O}, \text{Abgas, f}}$ in %	7,28	8,59
Stoffmengenanteil N ₂ (feucht) $\psi_{\text{N}_2, \text{Abgas, f}}$ in %	73,49	72,50
Stoffmengenanteil O ₂ (feucht) $\psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, f}}$ in %	11,50	9,78
Stoffmengenanteil CO ₂ (trocken) $\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, tr}}$ in %	8,34	9,99
Stoffmengenanteil N ₂ (trocken) $\psi_{\text{N}_2, \text{Abgas, tr}}$ in %	79,26	79,32
Stoffmengenanteil O ₂ (trocken) $\psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, tr}}$ in %	12,40	10,70
Abgastemperatur ϑ_{Abgas}	209,66	227,30
Heizleistung $\dot{E}_{\text{Wärme}}$ in kW	7,043	6,918
Wirkungsgrad in %	83,03	84,12

4.6 Resultate der Validierung und Vergleich mit Messwerten

In den Abbildungen 4.17 bis 4.29 sind die wichtigsten Ergebnisse der Validierungsrechnungen zusammengefasst. Sie zeigen Schnittansichten jeweils in der mittleren Längs- und Frontalebene und ermöglichen eine Detailanalyse der im Inneren der Kaminöfen stattfindenden Vorgänge.

Die in Abbildung 4.17 und 4.18 dargestellten Geschwindigkeitsverteilungen zeigen eine Zirkulationszone im vorderen unteren Bereich, welche durch die Scheibenspülluft erzeugt wird und die Flamme zur Rückwand treibt. Diese Flammencharakteristik stimmt gut mit den Beobachtungen der Messungen überein. Darüber hinaus ist bei beiden Kaminöfen eine Asymmetrie der Strömung erkennbar, die aus der nichtzentrischen Luftzuführung resultiert.

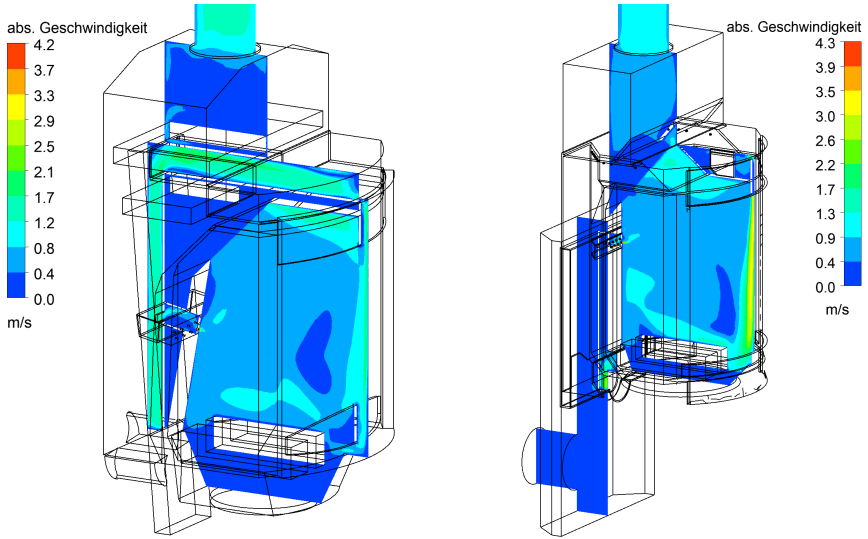


Abbildung 4.17: Verteilung der absoluten Geschwindigkeit auf der Längsebene (links Kaminofen „K 1“, rechts „K 2“)

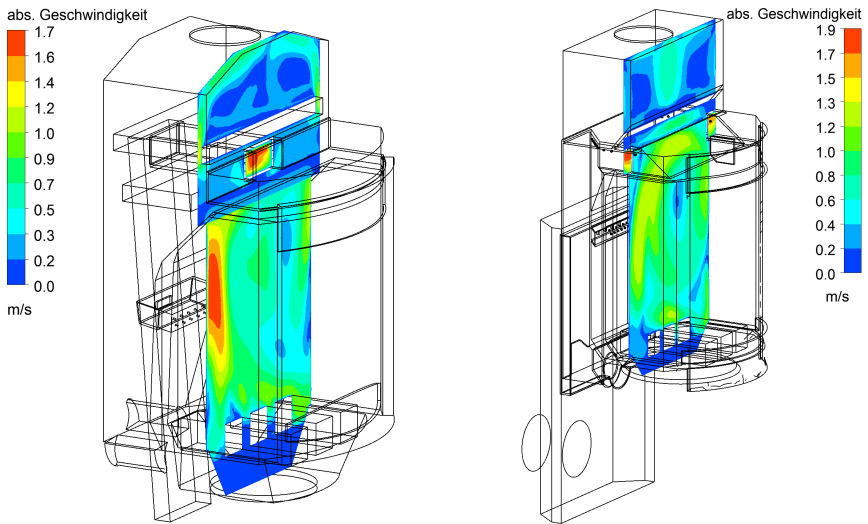


Abbildung 4.18: Verteilung der absoluten Geschwindigkeit auf der Frontalebene (links Kaminofen „K 1“, rechts „K 2“)

Die Temperaturen, welche in den Abbildungen 4.19 und 4.20 gezeigt werden, erreichen Spitzenwerte von 1100 °C und lassen erkennen, dass die Scheibenspülluft die Flamme zur Rückwand treibt. Die hohen Temperaturwerte sind durch die stationären Simulationsbedingungen und das gewählte Verbrennungsmodell bedingt. In der Realität zeigt sich kein stationäres, stabiles Flammenbild, sondern es entstehen zeitlich schwankende Flammenbilder, weshalb die Gastemperaturen nicht direkt miteinander verglichen werden können. Die Temperaturen der Festkörper und Außenoberflächen (siehe Abbildung 4.21) stimmen im Mittel gut mit den Messwerten überein, wie aus Tabelle 4.13 hervorgeht.

Tabelle 4.13: Mittlere Temperaturen und deren Standardabweichung für die simulierten Fälle (in Klammern stehende Werte sind Messwerte nach Tabelle 4.8)

Bezeichnung der Simulation	Abgastemp. in °C	Feuerraumtemp. in °C	Außenoberfläche in °C	Filtertemp. (unten) in °C	Filtertemp. (oben) in °C
K 1 (13 % H ₂ O)	267 (192±10)	402 (432±55)	203 (165±62)	483 (491±86)	463 (390±57)
K 2 (13 % H ₂ O)	337 (277±23)	437 (474±48)	183 (178±81)	508 (530±76)	424 (439±55)

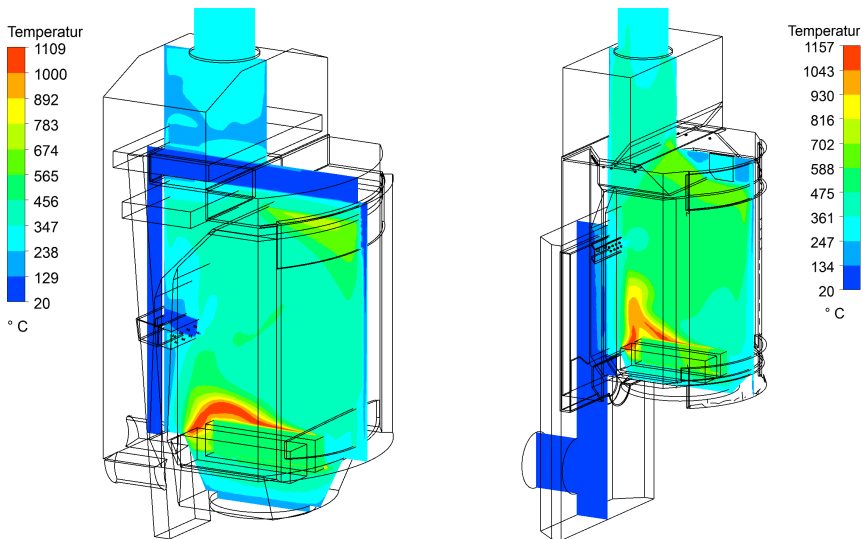


Abbildung 4.19: Temperaturverteilung auf der Längsebene (links Kaminofen „K 1“, rechts „K 2“)

Die in den Abbildungen 4.19 und 4.20 gezeigten Temperaturverteilungen stellen die Bereiche der kalten Zuluft deutlich dar. Im Falle des Kaminofens „K 1“ wird diese mittig oberhalb des Feuerraumes durch einen Luftkanal geführt und dabei leicht vorgewärmt. Daher scheint es so, als ob der Kaminofen von einer kalten Zone in zwei warme Bereiche getrennt wird. Das heiße Abgas strömt links und rechts an diesem Luftkanal vorbei zu den beiden oberen Umlenkplatten. Der Kaminofen „K 2“ weist keinen solchen, den Abgasweg kreuzenden Luftkanal auf. Zu besserer Verdeutlichung der Luftzufuhr sei auf die Abbildungen im Abschnitt 3.3.1 verwiesen.

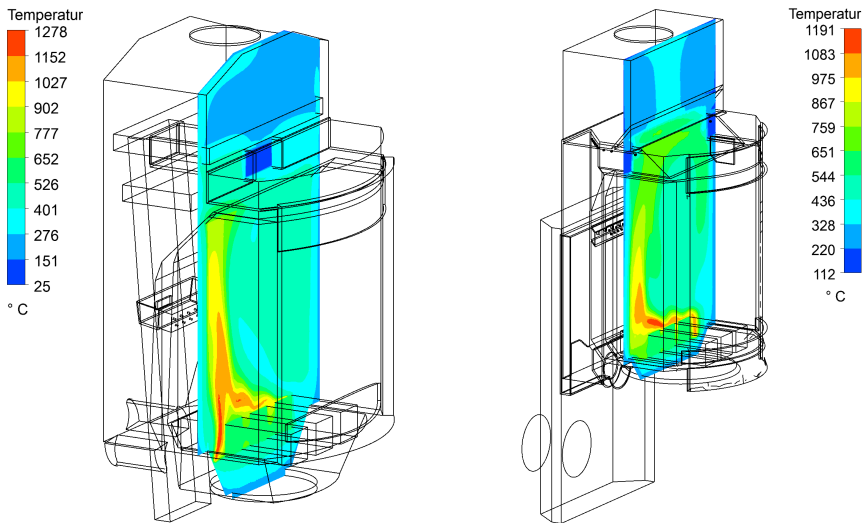


Abbildung 4.20: Temperaturverteilung auf der Frontalebene (links Kaminofen „K 1“, rechts „K 2“)

Die Abgastemperaturen der Simulation sind ca. 100 K größer als bei der Messung, was bei dem gegebenen Abgasmassenstrom einer Leistung von ca. 700 W entspricht. Dieser Fakt bestätigt die schon im Kapitel 4.4 diskutierten Unstimmigkeiten zwischen den gemessenen Temperaturen der Außenoberflächen, den Messwerten der Abgastemperaturen und den daraus ermittelten Heizleistungen. Die Temperaturen des Kaminofens „K 2“ sind insgesamt größer als bei dem Kaminofen „K 1“. Der Grund dafür liegt in dem geringeren Luftverhältnis des Kaminofens „K 2“.

Aus den Abbildungen 4.19 und 4.20 wird ersichtlich, dass die Temperatur an der unteren Umlenkplatte größer als die Fluidtemperatur im Zentrum des Feuerraumes ist. Dieser Effekt kann durch die thermische Strahlung der Flamme auf die Umlenkplatte erklärt werden, die zu einer lokalen Temperaturerhöhung führt.

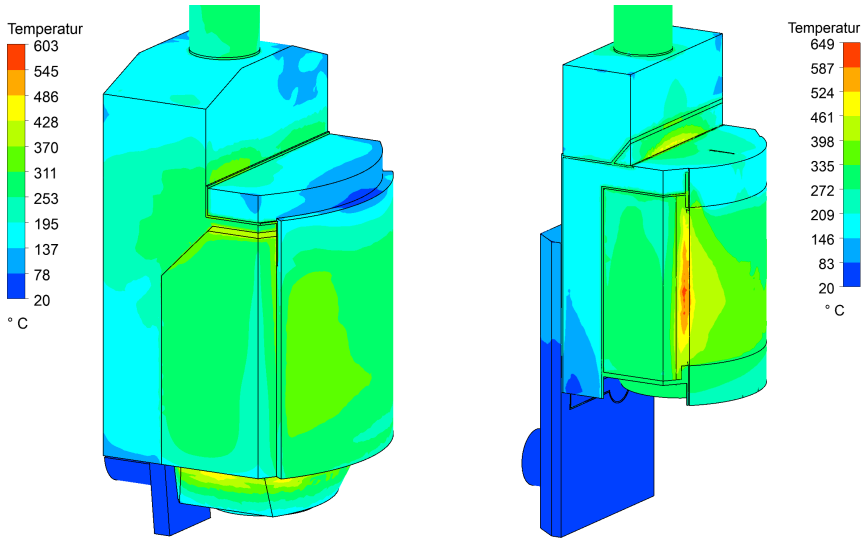


Abbildung 4.21: Temperaturverteilung auf den Außenoberflächen (links Kaminofen „K 1“, rechts „K 2“)

Die energetische Bilanzierung liefert die in Tabelle 4.14 angegebenen Werte. Die Abweichungen bei der Heizleistung korrespondieren sehr gut mit den höheren Abgastemperaturen, so dass davon ausgegangen werden muss, dass in der Simulation etwa 700 W weniger Energie an die Umgebung abgegeben wird, als die Messergebnisse erwarten lassen. Allerdings wurde in Kapitel 4.4 schon darauf hingewiesen, dass die Temperaturen der Außenoberflächen nur an einigen Punkten gemessen wurden und großen Schwankungen unterliegen.

Tabelle 4.14: Mittlere energetische Parameter für die simulierten Fälle und Vergleich mit Messwerten (in Klammern stehende Werte sind Messwerte nach Tabelle 4.9)

Bezeichnung	Wirkungsgrad	Heizleistung in kW	Brennstoffleistung in kW
K 1 (13% H ₂ O)	75,5 (84,7±1,3)	6,4 (7,2±0,6)	8,5 (8,5±0,6)
K 2 (13% H ₂ O)	76,4 (80,1±0,2)	6,3 (6,6±0,1)	8,2 (8,2±0,1)

Im Gegensatz zu den Messungen weist die Gesamtbilanz des Kaminofens „K 1“ einen leicht höheren Wirkungsgrad auf als der Kaminofen „K 2“. Obwohl der Massendurchsatz bei „K 1“ größer ist, da mehr Luft zugeführt wird, ist die Verweilzeit länger und die Heizleistung weist minimal höhere Werte auf. Die Unterschiede sind, wie bei den Messungen, fast im Bereich der Modellungenauigkeiten, da einige geometrische Gegebenheiten vernachlässigt wurden beziehungsweise vereinfacht abgebildet werden mussten.

Das Luftverhältnis und damit der zugeführte Luftmassenstrom in der numerischen Simulation wurde entsprechend den Messergebnissen festgelegt. Aus diesem Grund sollten bei vollständiger (keine brennbaren Rückstände) und vollkommener (keine Kohlenmonoxidbildung) Verbrennung die gemessenen Anteile an Kohlendioxid, Wasser und Sauerstoff im Abgas sehr gut mit den Simulationsergebnissen übereinstimmen, was nach Tabelle 4.15 auch der Fall ist.

Im Gegensatz dazu unterscheidet sich der berechnete Wert des Massenanteils Kohlenmonoxid am Abgasstutzen deutlich von den Messwerten. Während das Ergebnis des Kaminofens „K 1“ eine Abweichung von 128 % aufweist, ist der Unterschied beim Kaminofen „K 2“ –88 %. Ergebnisse aus einer reinen Verbrennungsrechnung (ohne Kohlenmonoxidbildung) auf Basis der stofflichen Bilanzierung sind im Vergleich zu den Simulationsergebnissen in Tabelle 4.16 angegeben und zeigen sehr geringe Abweichungen zwischen dem Bilanzmodell und der numerischen Simulation.

Tabelle 4.15: Mittlere Abgaszusammensetzung am Abgasstutzen (Rest Stickstoff) der simulierten Fälle und Vergleich mit Messwerten (in Klammern stehende Werte sind Messwerte nach Tabelle 4.1)

Bezeichnung der Simulation	Stoffmengenanteile in %			
	CO(tr)	CO ₂ (tr)	O ₂ (tr)	H ₂ O(feucht)
„K 1“ (13 % H ₂ O)	0,27 (0,12±0,09)	8,05 (8,4±2,83)	12,53 (12,29±3,11)	7,27 (7,7±2,96)
„K 2“ (13 % H ₂ O)	0,02 (0,16±0,16)	10,26 (9,97±3,03)	10,43 (10,8±2,77)	8,4 (6,88±4,6)

Tabelle 4.16: Mittlere Abgaszusammensetzung am Abgasstutzen (Rest Stickstoff) der simulierten Fälle (numerische Simulation/Verbrennungsrechnung)

Bezeichnung	Stoffmengenanteile in %		
	CO ₂ (feucht)	O ₂ (feucht)	H ₂ O(feucht)
K 1 (13 % H ₂ O)	7,47 / 7,73	11,62 / 11,5	7,27 / 7,28
K 2 (13 % H ₂ O)	9,4 / 9,13	9,55 / 9,78	8,4 / 8,59

Neben der Abgaszusammensetzung am Abgasstutzen liefert die Simulation auch die Gaszusammensetzungen in den beiden Kaminöfen, die für Kohlendioxid in Abbildung 4.22 und 4.23 dargestellt werden. Die größten Kohlendioxidanteile befinden sich demnach unmittelbar über den Holzscheiten bei der höchsten Temperatur und nehmen aufgrund von Verdünnungseffekten danach ab. Der Kaminofen „K 2“ weist aufgrund seines geringeren Luftverhältnisses auch höhere Kohlendioxidanteile als der Kaminofen „K 1“ auf.

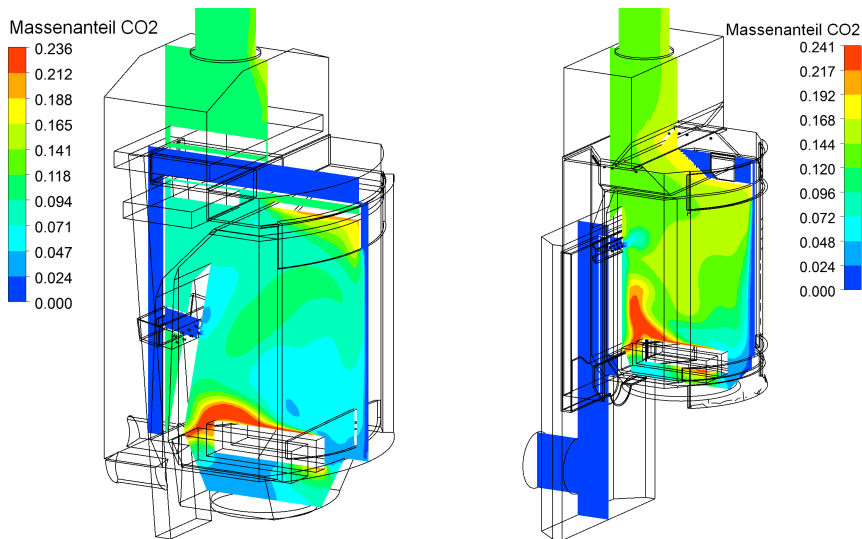


Abbildung 4.22: Verteilung des Massenanteils Kohlendioxid auf der Längsebene (links Kaminofen „K 1“, rechts „K 2“)

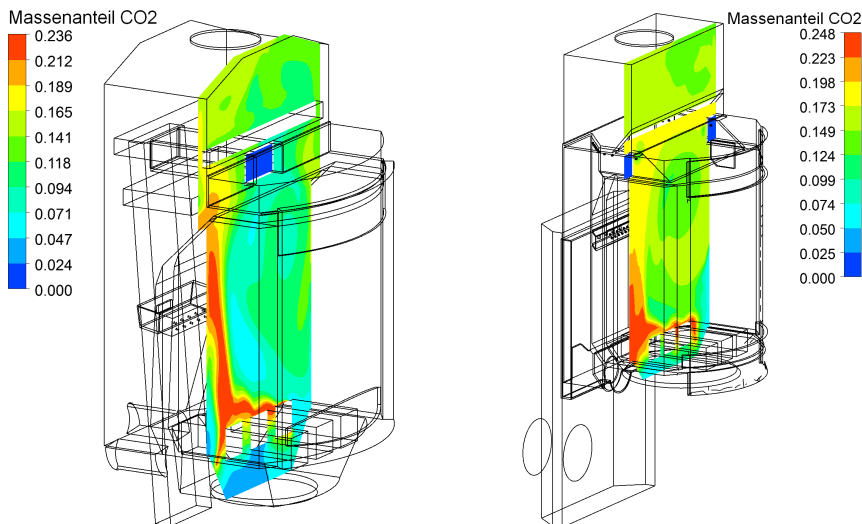


Abbildung 4.23: Verteilung des Massenanteils Kohlendioxid auf der Frontalebene (links Kaminofen „K 1“, rechts „K 2“)

In Abbildung 4.24 und 4.25 wird die Kohlenmonoxidverteilung in beiden Kaminöfen in der mittleren Schnittebene dargestellt. Unmittelbar an der Scheitoberfläche ist der Massenanteil von Kohlenmonoxid null und steigt dann in Abhängigkeit von der Temperatur an. Auf den rückwändig gelegenen Bereichen der Scheite, wo die größten Temperaturen auftreten, sind die Kohlenmonoxidanteile sehr gering. An dieser Stelle sind die Reaktionsgeschwindigkeiten des Kohlenmonoxidabbaus sehr groß. Im vorderen und unteren Bereich der Scheitoberfläche herrschen niedrigere Temperaturen, was diese Reaktionsgeschwindigkeit verringert und dort den Kohlenmonoxidanteil höher ausfallen lässt. Der Kohlenmonoxidanteil für den Kaminofen „K 2“ ist insgesamt um fast eine Größenordnung geringer als bei dem Kaminofen „K 1“, was durch die höheren mittleren Temperaturen erklärt werden kann.

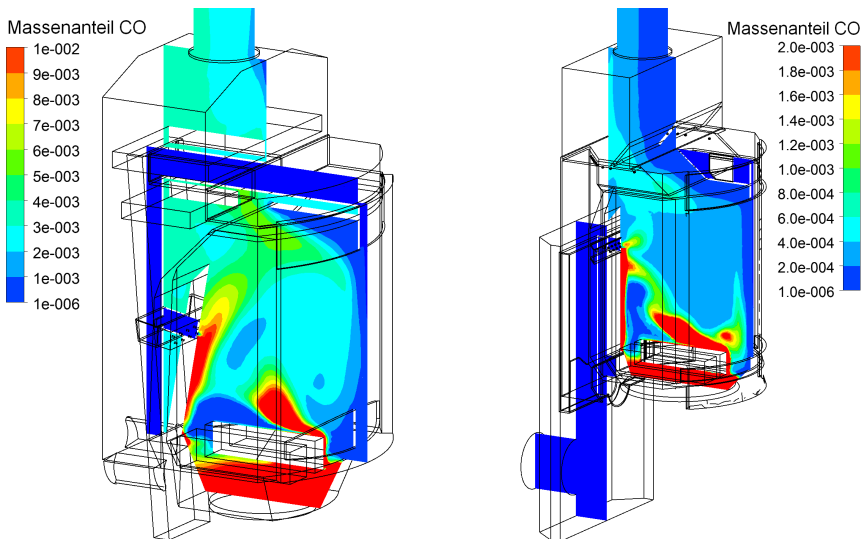


Abbildung 4.24: Verteilung des Massenanteils Kohlenmonoxid auf der Längsebene (links Kaminofen „K 1“, rechts „K 2“)

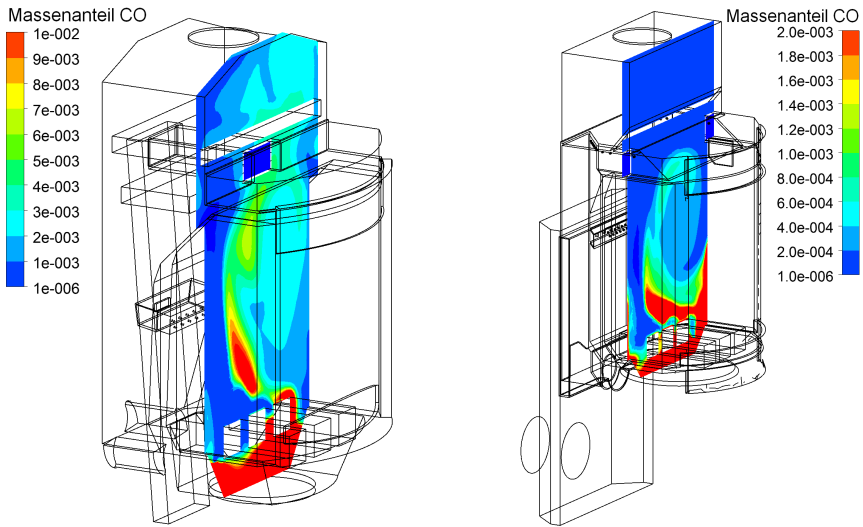


Abbildung 4.25: Verteilung des Massenanteils Kohlenmonoxid auf der Frontalebene (links Kaminofen „K 1“, rechts „K 2“)

Die Anteile von Schadgasen und Staub oder Ruß am Auslass hängen sowohl von der Temperatur als auch von der Verweilzeit ab und sollten bei Diskussionen hinsichtlich der Qualität des Kaminofens mit berücksichtigt werden. Im Gegensatz zu den experimentellen Untersuchungen liefert die numerische Simulation die Verweilzeit beziehungsweise das Fluidalter an jedem Punkt des Ofens und wird in Abbildung 4.26 und 4.27 dargestellt. Aus diesen Abbildungen und der Tabelle 4.17 geht hervor, dass der Kaminofen „K 1“ eine größere Verweilzeit am Auslassstutzen aufweist als Kaminofen „K 2“. Ursache dafür ist das weitaus größere Feuerraumvolumen beziehungsweise auch Gesamtvolumen ($V_{KA1} = 0,116744 \text{ m}^3$, $V_{KA2} = 0,095 \text{ m}^3$). Die Glutbetten stellen Toträume dar und werden kaum durchströmt, wodurch sich dort lokal hohe Verweilzeiten einstellen. Diese gehen aber nur zu einem geringen Anteil in den integralen Wert der Verweilzeit am Auslass ein.

Tabelle 4.17: Mittlere Verweilzeit in den Kaminöfen

Bezeichnung der Simulation	Verweilzeit (rtd) in s
K 1 (13 % H_2O)	9,3
K 2 (13 % H_2O)	8,8

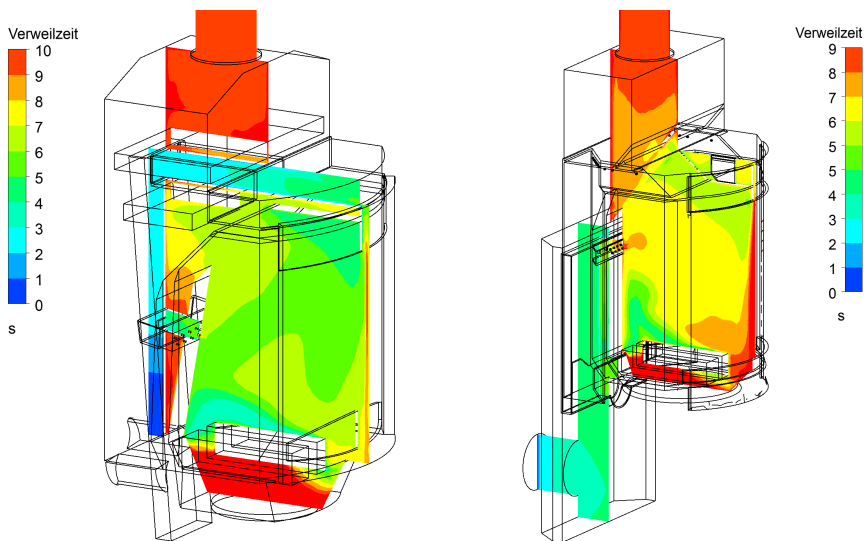


Abbildung 4.26: Verteilung der Verweilzeit auf der Längsebene (links Kaminofen „K 1“, rechts „K 2“)

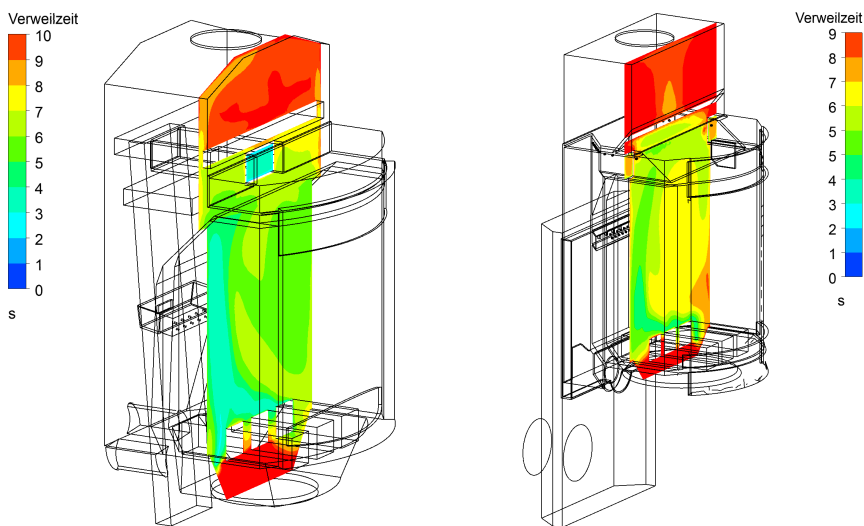


Abbildung 4.27: Verteilung der Verweilzeit auf der Frontalebene (links Kaminofen „K 1“, rechts „K 2“)

Da für den Rußmassenanteil keine Messdaten vorliegen, sollen hier Ergebnisse der numerischen Simulationen gezeigt und diskutiert werden. Aus Tabelle 4.18 kann entnommen werden, dass, basierend auf den numerischen Simulationen, der Kaminofen „K 1“ am Abgasstutzen einen geringeren Massenanteil an Ruß aufweist.

Tabelle 4.18: Massenanteil Ruß am Abgasstutzen

Bezeichnung der Simulation	Rußmassenanteil
K 1 (13 % H ₂ O)	0,002062
K 2 (13 % H ₂ O)	0,002292

Die in Abbildung 4.28 und 4.29 gezeigten Verteilungen des Rußmassenanteils zeigen, dass an den Stellen mit den größten Temperaturen der Rußmassenanteil sehr gering ist, was sich mit qualitativen experimentellen Untersuchungen deckt und den theoretischen Erwartungen entspricht. Stromabwärts dieser heißen Zone nimmt der Rußmassenanteil stetig zu und erreicht im vorderen oberen Teil des Feuerraumes sein Maximum. Dieser Fakt scheint der Logik zu widersprechen, da dort aufgrund der thermischen Strahlung lokal höhere Temperaturen auftreten und der Brennstoffmassenanteil schon sehr gering ist.

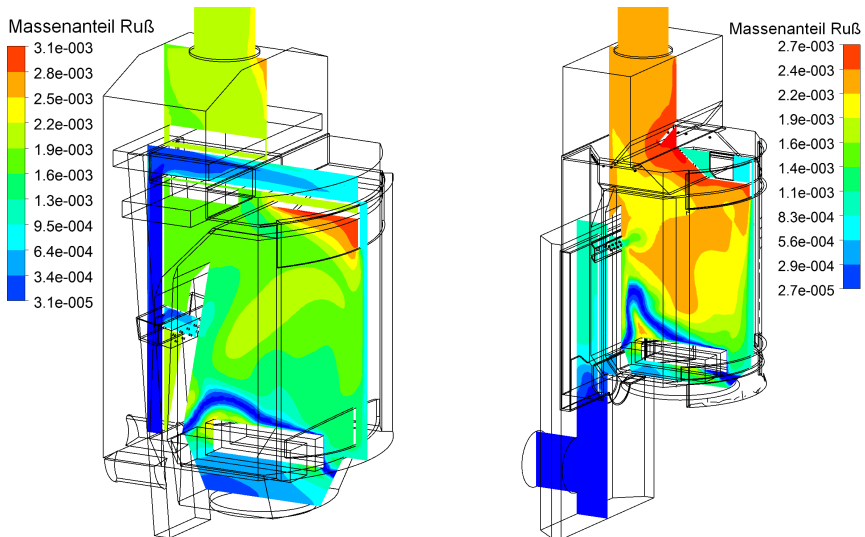


Abbildung 4.28: Verteilung des Massenanteils Ruß auf der Längsebene (links Kaminofen „K 1“, rechts „K 2“)

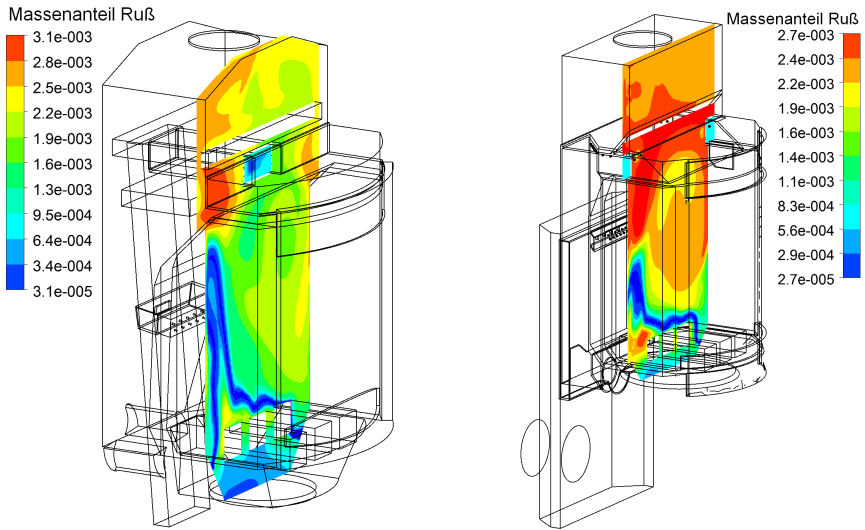


Abbildung 4.29: Verteilung des Massenanteils Ruß auf der Frontalebene (links Kaminofen „K 1“, rechts „K 2“)

Die Erklärung dafür ist in dem 2-Schritt-Rußmechanismus unter Berücksichtigung der Rußbildnerkonzentration zu finden. Anhand der in den Abbildungen 4.30 und 4.31 gezeigten Verteilungen wird deutlich, dass in der Verbrennungszone Rußbildner entstehen, die sich aufgrund der Strömung nach oben bewegen und ansammeln. In den oberen Bereichen werden sie aufgrund der höheren Temperaturen wieder zu Ruß abgebaut.

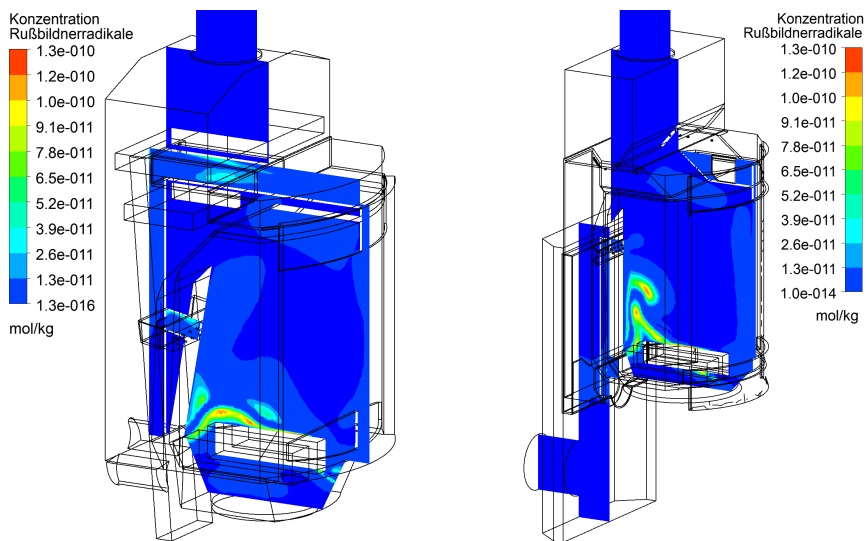


Abbildung 4.30: Verteilung der Konzentration der Rußbildnerradikale auf der Längsebene (links Kaminofen „K 1“ rechts „K 2“)

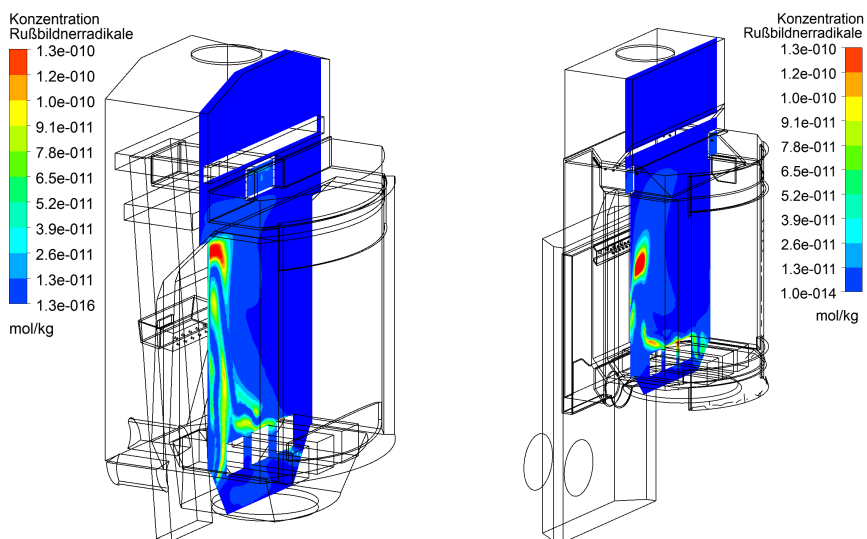


Abbildung 4.31: Verteilung der Konzentration der Rußbildnerradikale auf der Frontalebene (links Kaminofen „K 1“ rechts „K 2“)

Die Rußbildner wirken demnach als Verzögerungsglied in der Reaktionskette von Brennstoff zu Ruß. Da der Kaminofen „K 2“ einen anderen Strömungsverlauf als „K 1“ aufweist, wird insgesamt etwas mehr Ruß gebildet.

Zusammenfassend kann davon ausgegangen werden, dass die numerische Simulation Trends und Tendenzen für die Hauptgase gut abbildet, die Stoff- und Energiebilanzen wiedergegeben werden können und auch quantitative Aussagen bezüglich Temperatur, Heizleistung, Wirkungsgrad und Hauptgasmassenanteil möglich sind. Die quantitativen Aussagen über den Kohlenmonoxidgehalt sind fehlerbehaftet und sollten nur bedingt als Basis für weitere Untersuchungen herangezogen werden.

4.7 Ergebnisse und Diskussion der Modelleinflüsse auf die numerischen Simulationen zur Validierung

4.7.1 Diskussion des Lösungsverhaltens

Die numerischen Simulationen wurden auf Basis von Simulation mit geringerer Gitterauflösung durchgeführt, so dass die Residuen und Bilanzfehler beim Start schon niedrige Werte aufweisen. In Abbildung 4.32 sind die Verläufe der Restwerte (Residuen) sowie die Bilanzfehler dargestellt. Es ist erkennbar, dass die Restwerte abnehmen und ab ca. 2000 Iterationen einen periodisch schwankenden Verlauf auf einem niedrigen Niveau annehmen. Diese Schwankungen haben ihre Ursache in den mathematischen Algorithmen zur Lösung der partiellen Differentialgleichungen, zum Beispiel in der Genauigkeit der Abbildung der Partialgleichungsoperatoren (Gradient, Divergenz, etc.), der Rechengenauigkeit und den eingestellten Genauigkeitsanforderungen des Gleichungslösers für die linearen Gleichungen. Gerade in den ersten Iterationen sind starke Schwankungen bei den Residuen beobachtbar, was aus den großen Änderungen der Spezies und den damit verbundenen Energietransportprozessen resultiert. Ohne die in Abschnitt 3.4.1 beschriebenen speziellen Einstellungen und Verfahren zur Begrenzung der Quellterme bricht die Lösung unabhängig von der Wahl der Startparameter ab.

Da die Partialgleichungen miteinander gekoppelt sind, treten meist Rückkopplungseffekte auf. Die Restwerte der Energie im Fluid führen zum Beispiel zu einem veränderten Temperaturfeld in den Festkörpern, was wiederum die Energierestwerte im Fluid beeinflusst. Oft sind in diesem Zusammenhang Ursache und Wirkung schlecht voneinander zu trennen, so dass bei numerischen Problemen die Lösung nur durch schrittweise Veränderung der Zeitschrittweiten und Lösungsparameter gewonnen werden kann.

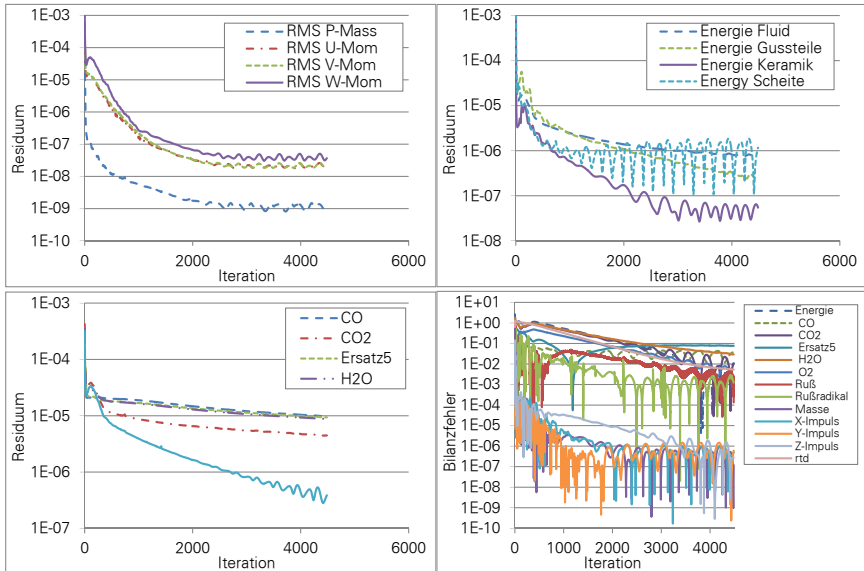


Abbildung 4.32: Verlauf von Konvergenz (quadratisches Mittel) und Bilanzfehler (in %) der Simulation des Kaminofens „K 1“

Das Lösungsverhalten wird stark bestimmt von den inneren Zirkulationen des Stoff- und Energietransportes. Während die Impuls- und Kontinuitätsgleichungen in Ansys CFX gekoppelt gelöst werden, erfolgt für die übrigen partiellen Differentialgleichungssysteme für Energie, Spezies, Strahlung und Ruß eine entkoppelte Berechnung. Sie werden einzeln für sich berechnet und erst nach jeder Iteration miteinander verknüpft. Die numerische Lösung weist daher ein schwankendes Verhalten auf und wurde durch quantitative und qualitative Analysen überprüft.

Darüber hinaus wird die Simulation durch eine positive Rückkopplung bei der Energietransportgleichung erschwert und dadurch der Rechenaufwand erhöht: Zuströmende Luft wird durch den Feuerraum oder daran entlang geführt und erwärmt. Dadurch erhöht sich die Temperatur in der Reaktionszone, die Reaktion wird beschleunigt, wodurch die einströmende Luft noch weiter erwärmt wird.

In Bereichen hoher Gitterauflösung werden unter Umständen niedrigfrequente Geschwindigkeitsschwankungen erfasst, was einer Simulation turbulenter Strukturen gleichkommt. Ohne Turbulenzmodell kann dann manchmal kein stationäres Geschwindigkeitsfeld berechnet werden und es ergeben sich Schwankungen bei den Residuen und Bilanzfehlern, die allerdings nur temporär auftreten. Bei den Simulationen des Kaminofens „K 1“ tritt dieser Effekt im Zuluftkanal auf und führt dazu, dass sich die Schwankungen bis in den Feuerraum ausbreiten und dort weitere Schwankungen im Druck-, Geschwindigkeits-, Temperatur- und Speziesfeld hervorrufen. Eine Erhöhung der Zeitschrittweite bei gleichzeitiger Erhöhung der Genauigkeitsanforderungen

an den linearen Löser mittels weiterer Expert-Parameter führt zur Glättung der Schwankungen und somit zur Lösung dieses numerischen Problems.

4.7.2 Ergebnisse der Gitteranalyse

Die Diskretisierung des Rechengebietes in Kontrollvolumen hat einen großen Einfluss auf die Genauigkeit des Ergebnisses. Am sensibelsten reagierten die simulierten Werte der Kohlenmonoxidanteile auf Änderungen der Gitterauflösung. Zur Einschätzung dieser Veränderungen wurde der integrale Werte am Abgasstutzen herangezogen und das Netz schrittweise verfeinert. Die Ergebnisse dieser Gitteranalyse sind in Tabelle 4.19 dargestellt. Aus dieser kann entnommen werden, dass der Wärmestrom nur eine geringe Abhängigkeit von der Anzahl der Zellen aufweist und die Rechenzeit nahezu linear mit der Zellanzahl ansteigt. Die großen Änderungen des Kohlenmonoxidanteils resultieren aus den unterschiedlichen Luftmassenströmen der Scheibenspülluft und der Sekundärluft.

Tabelle 4.19: Eigenschaften und Ergebnisse der Gitteranalyse für den Kaminofen „K 1 (relative Differenzen sind auf die höchste Auflösung bezogen)

mittlere Auflösung in mm	Anz. Zellen in Mio.	Rechenzeit in d	Heizleistung in W	CO(Abgas) in Vol.-%(tr)	rel.Differenz der Heizleistung in %	rel. Differenz von CO(Abgas) in %
3,2	2,2	8	-6438	0,170	0,623	38,40
2,24	4,8	16	-6390	0,272	-0,134	1,43
1,8	6,6	24	-6398	0,276	0,000	0,00

Der Unterschied zwischen den Ergebnissen mit der höchsten Gitterauflösung und der mittleren Auflösung beträgt für den Massenanteil Kohlenmonoxid 1,43 %. Der Abbildung 4.33 kann entnommen werden, dass die Unterschiede auch im Inneren des Kaminofens in dieser Größenordnung liegen. Im Bereich der Reaktionszone sind die Unterschiede am größten und nehmen stromabwärts immer weiter ab.

Die höchste Auflösung macht in Anbetracht der Rechenzeit nur bedingt Sinn, da die erreichten Genauigkeiten von ca. 1 % wesentlich kleiner als die Unterschiede zwischen den Messergebnissen und der Simulation sind. Daher kann die mittlere Auflösung mit 4,8 Millionen Zellen als ausreichend genau angesehen und zur Basis der weiteren Untersuchungen genutzt werden. Alle numerischen Simulationen des Kaminofens „K 1“ (mit Ausnahme der Gitteranalyse) verwenden diese Gitterauflösung.

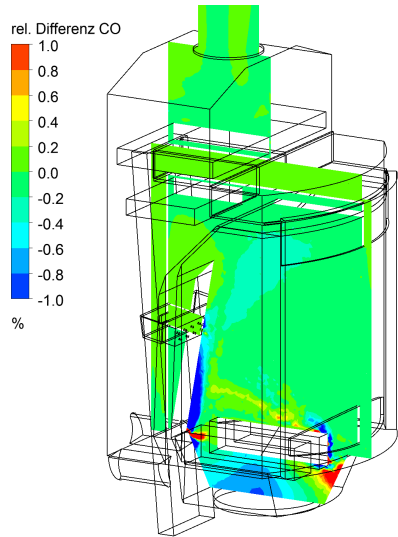


Abbildung 4.33: Unterschied des Massenanteils Kohlenmonoxid zwischen mittlerer und höchster Auflösung bezogen auf den maximalen Kohlenmonoxidanteil

4.7.3 Ergebnisse der Simulationen mit Turbulenzmodell und veränderter turbulenter Prandtl- und Schmidt-Zahl

Die in Tabelle 4.20 dargestellten Heizleistungen zeigen einen deutlichen Einfluss der Turbulenzmodelle auf den konvektiven inneren Wärmeübergang vom Fluid auf die Wand. Bei Verwendung eines Turbulenzmodells wird der konvektive Wärmestrom geringer. Eine veränderte turbulente Prandtl-Zahl hingegen führt zu kaum feststellbaren Veränderungen des inneren, konvektiv übertragenen Wärmestromes.

Tabelle 4.20: Eigenschaften und Ergebnisse bei Veränderung des Turbulenzmodells (relative Differenzen sind auf laminaren Fall bezogen)

Turbulenz- modell	Heizleistung in W			CO(Abgas) in Vol-%(tr)	Heizleistung rel.Differenz in %	rel.Differenz von CO(Abgas) in %
	Gesamt	Konvektiv	Strahlung			
laminar	-6390	-1089	-2567	0,272	0	0
SST $Pr_{turb}=0,9$	-6367	-843	-2813	0,296	-0,358	8,65
SST $Pr_{turb}=0,7$	-6376	-846	-2815	0,292	-0,213	7,21
SST $Pr_{turb}=f(\mu_{turb})$	-6364	-841	-2813	0,300	-0,410	10

Anhand der Darstellung in Abbildung 4.34 wird deutlich, dass der innere konvektive Wandwärmestrom bei der numerischen Simulation ohne Turbulenzmodell im oberen vorderen Bereich größer ist. Die Außenoberfläche der Schamottewand wurde in dieser Abbildung ausgeblendet, da in der Schamotte weder Konvektion noch thermische Strahlung auftreten und auf der Außenwand kein konvektiver Wandwärmestrom angebbbar ist.

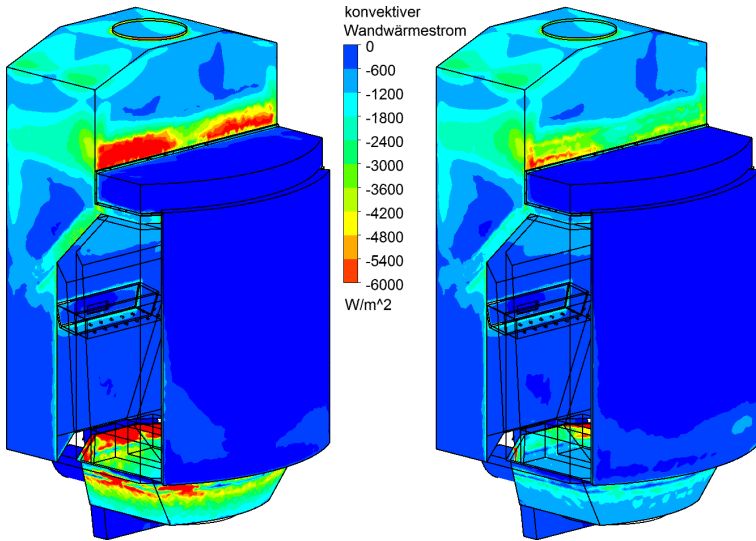


Abbildung 4.34: Verteilung des inneren konvektiven Wandwärmestromes ohne (links) und mit (rechts) Turbulenzmodell (SST mit $Pr_{\text{turb}} = 0,9$) beim Kaminofen „K 1“

Der größere Wärmestrom bei Simulation ohne Turbulenzmodell entspricht nicht den Erwartungen. Da das Turbulenzmodell gemäß Gleichung (3.18) immer zu einer Vergrößerung der Wärmeleitfähigkeit führt, müssten sich auch größere konvektive Wärmeströme ergeben, was allerdings nicht simuliert wurde. Der Grund dafür ist, dass die Temperatur an vielen Wandbereichen aufgrund der thermischen Strahlung lokal höher als die des wandnahen Fluides ist. Die höhere Wärmeleitfähigkeit aufgrund des Turbulenzmodells führt zu einem besseren Energietransport in der wandnahen Umgebung und somit zum Abtransport von Energie von der Wand zurück in das Fluid. Die somit auftretenden, geringeren Temperaturen an der Wand werden durch einen erhöhten Strahlungsaustausch zwischen der Flamme und der Wand kompensiert. Aus Abbildung 4.35 kann entnommen werden, dass in Wandbereichen mit geringem konvektiven Wärmestrom größere Wärmeströme aufgrund von thermischer Strahlung auftreten.

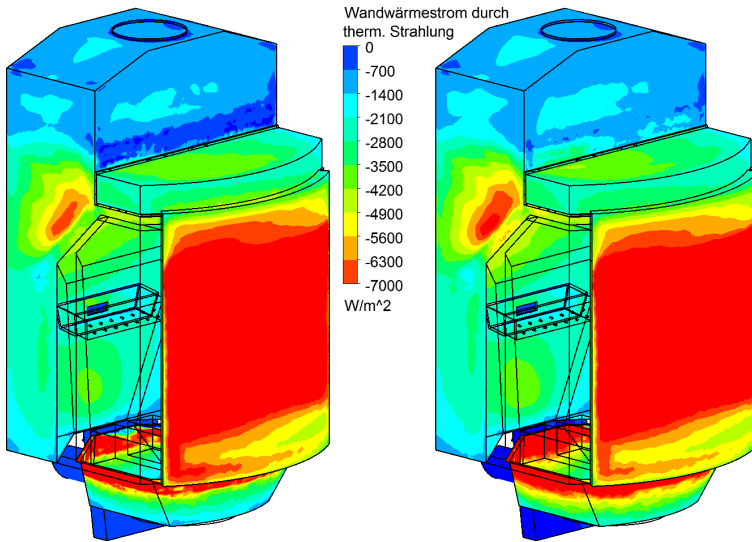


Abbildung 4.35: Verteilung des inneren Wandwärmestromes aufgrund von thermischer Strahlung ohne (links) und mit (rechts) Turbulenzmodell (SST mit $Pr_{\text{turb}} = 0,9$) beim Kaminofen „K 1“

In den Bereichen mit unterschiedlichem, konvektivem Wärmestrom ergab sich nur eine geringe Turbulenz, so dass die effektive thermische Leitfähigkeit (inklusive der turbulenten Wärmeleitfähigkeit) bei Nutzung eines Turbulenzmodells insgesamt nur um ca. 10 % größer als ohne Turbulenzmodell wurde. Dieser Effekt erhöht allerdings nicht die Heizleistung, sondern wird durch die thermische Strahlung ausgeglichen. Insgesamt ergeben sich daher nur Abweichungen im Bereich von unter 0,5 % für die Gesamtheizleistungen bei Verwendung eines Turbulenzmodells.

Tabelle 4.20 zeigt, dass der Kohlenmonoxidanteil im Abgas wesentlich von der Verwendung eines Turbulenzmodells beeinflusst wird. Im Inneren des Feuerraumes verteilt sich Kohlenmonoxid aufgrund der zusätzlichen turbulenten Mischungsvorgänge beim Einsatz eines Turbulenzmodells besser als ohne Turbulenzmodell (siehe Abbildung 4.36). Die effektive Viskosität, d.h. die Viskosität des reinen Fluides inklusive der aufgrund turbulenter Vorgänge induzierten, zusätzlichen Viskosität, wird auf der mittleren Schnittebene in Abbildung 4.37 gezeigt.

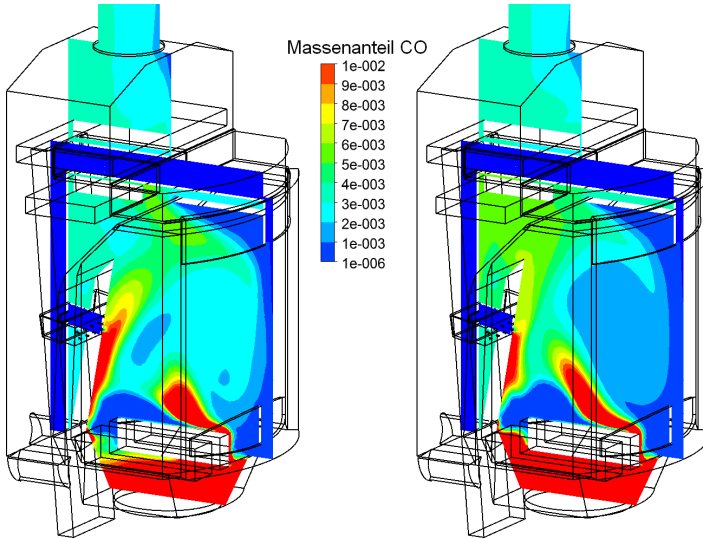


Abbildung 4.36: Verteilung des Kohlenmonoxidanteils ohne (links) und mit (rechts) Turbulenzmodell (SST mit $Pr_{\text{turb}} = f(\mu_{\text{turb}})$) auf der Längsebene beim Kaminofen „K 1“

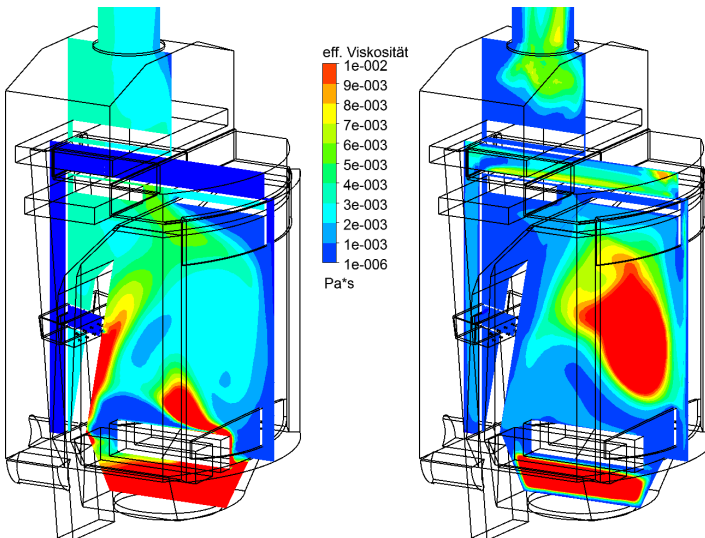


Abbildung 4.37: Verteilung der dynamischen Viskosität ohne (links) und mit (rechts) Turbulenzmodell (SST mit $Pr_{\text{turb}} = f(\mu_{\text{turb}})$) auf der Längsebene beim Kaminofen „K 1“

Die Kohlenmonoxidanteile am Auslass werden zwar deutlich von der Wahl eines Turbulenzmodells beeinflusst, die verschiedenen Werte für die turbulente Schmidt-Zahl zeigen aber einen untergeordneten Einfluss auf das Ergebnis. Vor dem Hintergrund der großen Abweichungen der Kohlenmonoxidanteile zwischen den Messungen und den numerischen Simulationen (siehe Tabelle 4.15) ist allerdings die Wahl eines Turbulenzmodells als wenig relevant anzusehen.

4.7.4 Ergebnisse bei verändertem Reaktionsmechanismus

Die Resultate der numerischen Simulation des Kaminofens „K 1“ zeigten wie schon in Abschnitt 3.1.2 sehr geringe Werte der Kohlenmonoxidanteile im Abgas von $9 \cdot 10^{-4} \%$ beziehungsweise 9 ppm. Dieser Wert liegt mehrere Größenordnungen unter dem Messwert. Insgesamt zeigte sich diese numerische Simulation als numerisch instabil und es musste deshalb mit geringeren Zeitschrittweiten gerechnet werden, was die Rechenzeit im Vergleich zum 2-Schritt-Mechanismus unter Verwendung des Ersatzgases „Ersatz5“ nahezu verdoppelte. Für die Simulationen von Kaminöfen unter der Annahme quasistationärer Bedingungen eignet sich der Reaktionsmechanismus von Jones u. Lindstedt (1988) daher weniger als der in Abschnitt 3.1.2 beschriebene Reaktionsmechanismus unter Verwendung eines künstlichen Ersatzgases.

4.8 Ergebnisse der Parameterstudie

4.8.1 Ergebnisse der numerischen Simulationen zur Optimierung der Geometrie

Die 26 Simulationen der Parameterstudie zur Optimierung der Geometrie liefern eine Vielzahl an Informationen, deren Detaildarstellung nicht zweckmäßig ist. Aus diesem Grund wurden fünf wesentliche Berechnungsergebnisse als Zielgrößen ausgewählt (Heizleistung, Kohlenmonoxidkonzentration, Rußkonzentration, Luftmassenstrom und Sekundärluftmassenstrom) und zur Einschätzung der Qualität der einzelnen Fälle herangezogen. Aufgrund der Unsicherheit der qualitativen Ergebnisse ist nicht das einzelne Ergebnis, sondern immer der qualitative Vergleich der Fälle untereinander ausschlaggebend. Dementsprechend wurden die Simulationsergebnisse entsprechend der Parameter sortiert und über diese aufgetragen. In den Abbildungen 4.38 bis 4.42 werden die fünf Ergebnisse dargestellt, wobei die zwei Luftkonfigurationen („zwangsbelüftet“ und „freier Zug“) jeweils zusammen in einem Diagramm abgebildet werden. Alle Simulationsergebnisse sind auf den zwangsbelüfteten Standardfall normiert. Ausgehend davon, werden die Einflüsse der einzelnen Parameter diskutiert und Trends und Tendenzen erläutert.

Eine große **Feuerraumhöhe** führt zu einer größeren Außenoberfläche, was eine höhere Heizleistung ermöglicht. Gleichzeitig entstehen durch die größere Feuerraumhöhe auch größere Kaminwirkungen, die bei freiem Zug größere Luftmassenströme ansaugen, was geringere Verbrennungstemperaturen hervorruft und die Heizleistung mindert. Deutlich erkennbar ist insgesamt aber eine zunehmende Vergrößerung der Heizleistung mit größer werdendem Feuerraum, im Falle von freiem Zug mit etwas geringerem Anstieg. So beträgt zum Beispiel der Unterschied der Außenoberflächen zwischen der kleinsten und größten Feuerraumhöhe mehr als 20 %, die Heizleistung weicht aber nur 5 % voneinander ab.

Die Kohlenmonoxidkonzentration nimmt mit der Feuerraumhöhe stetig zu und zeigt damit unabhängig von der Luftkonfiguration eine Korrelation mit dem zunehmenden Gesamtmassenstrom Luft. Der Grund dafür ist die Abnahme der mittleren Feuerraumtemperatur, wodurch die Reaktion von Kohlenmonoxid zu Kohlendioxid weniger schnell abläuft.

Die Rußkonzentration fällt mit steigender Feuerraumhöhe im Fall von Zwangsbelüftung. Bei freiem Zug hingegen ist sie bei kleinster und mittlerer Feuerraumhöhe nahezu gleich und fällt erst bei der größten ab. Sie zeigt dabei eine Abhängigkeit vom Sekundärluftmassenstrom, der bei mittlerer Feuerraumhöhe ein Minimum aufweist. Die Rußabnahme kann dadurch erklärt werden, dass bei mittlerer Feuerraumhöhe der Luftstrom größer, der davon abgezweigte Sekundärluftstrom aber geringer wird und sich beide Effekte (Erhöhung der Rußkonzentration durch mehr Gesamtluft, Verringerung von Ruß durch weniger Luft direkt in Verbrennungszone) ausgleichen.

Die **Zellweite** des Filters hat bei Zwangsbelüftung keinen Einfluss auf die fünf Ergebnisse, da sich nur der Druckverlust über den Filter ändert und die zugeführte Luft konstant gehalten wird. Bei freiem Zug beeinflusst die Zellweite die Ergebnisse dahingehend, dass größere Zellweiten die Heizleistung steigern und die Kohlenmonoxid- sowie Rußkonzentration senken. Dieser Effekt lässt sich auf eine Veränderung des gesamten Luftmassenstromes und des Sekundärluftmassenstromes zurückführen. Der Filter bewirkt demnach eine Änderung des Druckverlustes und so der Strömungsverhältnisse im Kaminofen.

Unabhängig von der Luftkonfiguration existiert kaum ein Unterschied zwischen der Heizleistung bei den unteren beiden Werten der **Filterfläche**. Erst bei der größten Filterfläche steigt die Heizleistung an. Die Erklärung dafür ist, dass mit größerer Filterfläche auch der Feuerraum kleiner beziehungsweise der Abgaskanal größer wird, da die größere Filterfläche nur mit größerem Winkel erreicht werden kann (siehe Abbildung 3.27). Um den Feuerraum befindet sich jedoch die Feuerraumwand, die als Dämmung gegenüber dem Energietransport zur Umgebung wirkt. Der oberhalb des Filters liegende Abgaskanal wird nur durch das Stahlblech von der Umgebung getrennt. Je kleiner also der Feuerraum bei konstantem Gesamtvolumen ist, desto größer ist die Heizleistung. Die größere Filterfläche führt somit indirekt zu größerer Heizleistung.

Die bei größer werdenden Filterflächen geringeren, mittleren Geschwindigkeiten im Filter führen zu einer sehr kleinen Verringerung des Druckverlustes um ca. 1 %. Größere Filterflächen haben demnach einen größeren Luftmassenstrom bei freiem Zug zur Folge. In Abbildung 4.41 ist allerdings deutlich ein Maximum des Luftmassenstromes bei dem mittleren Wert der Filterfläche erkennbar. Bei der größten Filterfläche wird der Luftmassenstrom wieder geringer, da die Heizleistung steigt, die mittlere Feuerraumtemperatur dadurch sinkt und somit der Zug geringer wird.

Die Kohlenmonoxidkonzentration weist ein Maximum bei dem mittleren Wert der Filterfläche auf, was durch den steigenden Sekundärluftmassenstrom bei sinkendem Feuerraumvolumen erklärbar ist. Die Kohlenmonoxidkonzentration im Filter ist bei der größten Filterfläche höher als bei der mittleren Filterfläche und sinkt danach schneller auf ein niedrigeres Niveau am Abgasstutzen ab.

Die Rußkonzentrationen zeigen bei Zwangsbelüftung einen entgegengesetzten Verlauf wie die Kohlenmonoxidkonzentrationen und weisen ein Minimum bei dem mittleren Wert der Filterfläche auf. Bei freiem Zug nimmt die Rußkonzentration mit der Filterfläche zu.

Die **Position der Sekundärluft** hat bei Zwangsbelüftung einen geringen Einfluss auf die Heizleistung und den Kohlenmonoxidanteil. Nur bei freiem Zug und niedrigster Position erhöht sich die Heizleistung und verringert sich die Kohlenmonoxid- sowie Rußkonzentration. Der Sekundärluftmassenstrom hingegen steigt mit höherer Position stetig an.

Der **Filterwinkel** weist einen positiven Einfluss auf die Heizleistung und die Kohlenmonoxidkonzentration auf, während die Rußkonzentration mit steigendem Filterwinkel abnimmt. Wie schon bei der Filterfläche erwähnt, führen niedrige Filterwinkel zu einer Vergrößerung des Feuerraumvolumens, was sich negativ auf die Heizleistung auswirkt, da der Feuerraum durch die Schamottschicht besser thermisch gedämmt wird und weniger Wärme nach außen abgibt als über den oberen Abgaskanal, der nur durch ein Stahlblech von der Umgebung getrennt ist.

Die Verweilzeiten liegen im Bereich von 8 bis 12 Sekunden und sind damit etwas größer als bei den Validierungssimulationen. Grund dafür sind die geringeren Massenströme an Holz und Luft bei ähnlichen Volumen von Feuerraum und Abgasführung nach dem Filter.

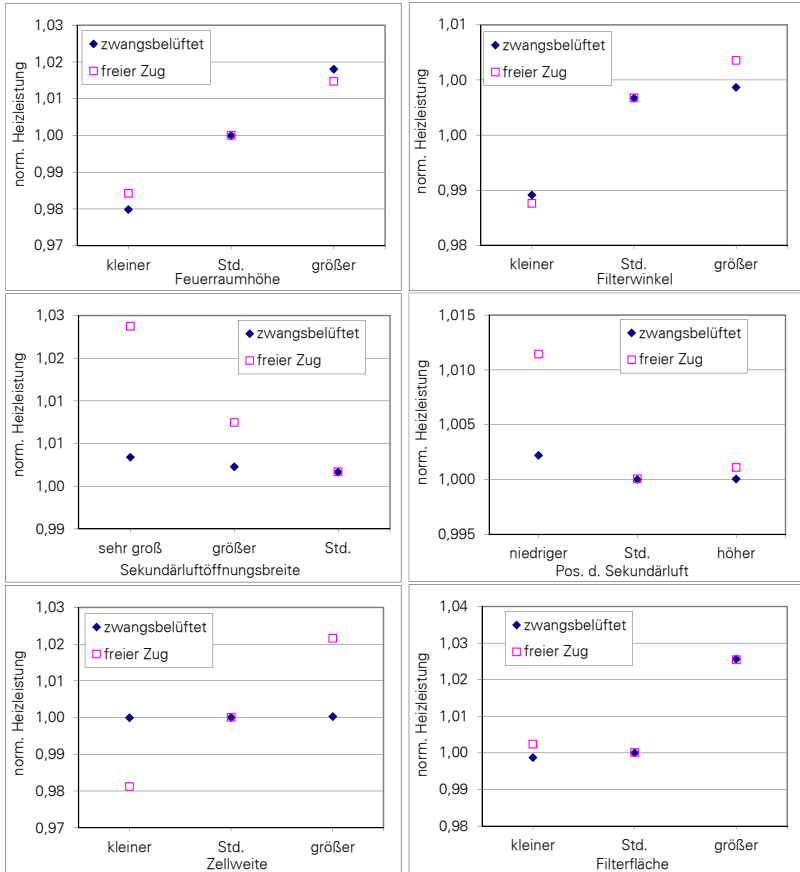


Abbildung 4.38: Heizleistung in Abhängigkeit von Feuerraumhöhe, Filterwinkel, Sekundärluftöffnungsbreite, Position der Sekundärluft, Zellweite und Filterfläche

Die Heizleistung zeigt eine Abhängigkeit von der Feuerraumhöhe, dem Filterwinkel, der Filterfläche und, bei freiem Zug, von der Sekundärluftöffnungsbreite und der Zellweite. Insgesamt unterscheiden sich die Heizleistungen nur um etwa 4 % voneinander.

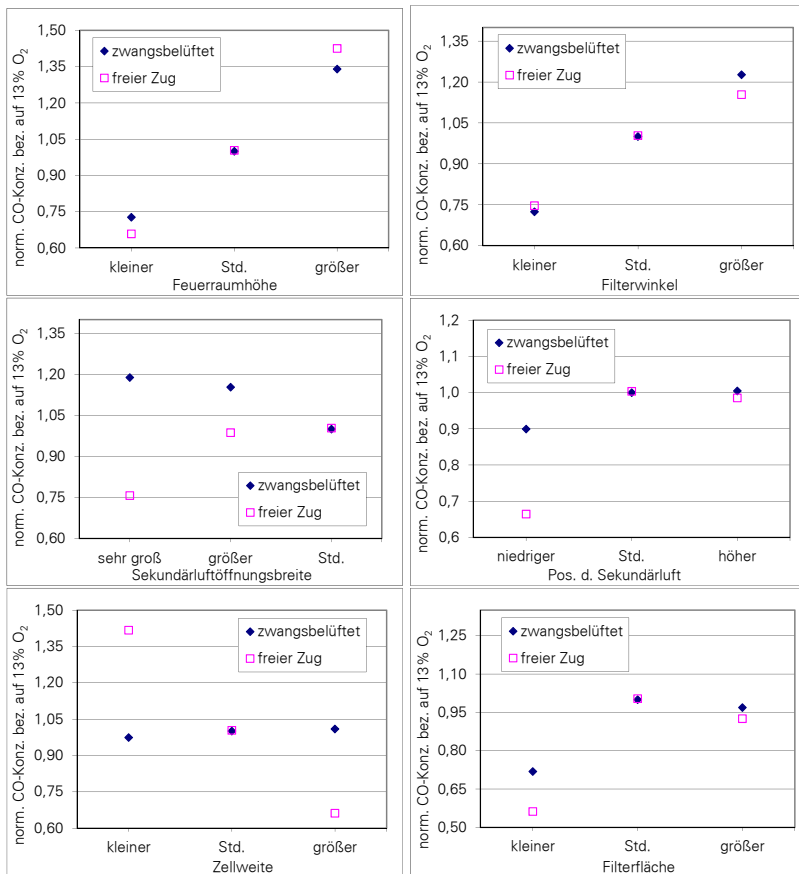


Abbildung 4.39: Kohlenmonoxidkonzentration in Abhängigkeit von Feuerraumhöhe, Filterwinkel, Sekundärluftöffnungsbreite, Position der Sekundärluft, Zellweite und Filterfläche

Die Kohlenmonoxidkonzentrationen steigen linear mit zunehmenden Werten von Feuerraumhöhe und Filterwinkel. Bei freiem Zug sinken die Konzentrationen bei höheren Zellweiten. Bei Zwangsbelüftung existiert hingegen kein Einfluss der Zellweite. Die Sekundärluftöffnungsbreite führt bei den zwei Luftkonfigurationen zu unterschiedlichen Tendenzen. Bei freiem Zug fallen die Kohlenmonoxidkonzentrationen mit enger werdendem Querschnitt. Wird der Kaminofen zwangsbelüftet, so steigen die Konzentrationen mit engerem Querschnitt an.

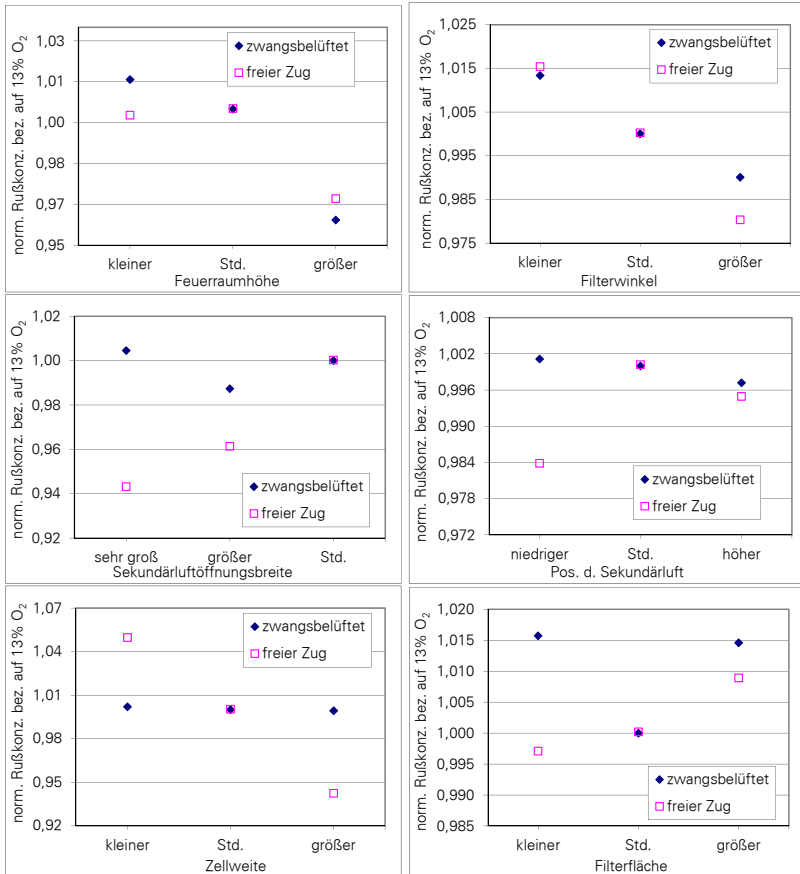


Abbildung 4.40: Rußkonzentration in Abhängigkeit von Feuerraumhöhe, Filterwinkel, Sekundärluftöffnungsbreite, Position der Sekundärluft, Zellweite und Filterfläche

Die Rußkonzentrationen bezogen auf 13 % Sauerstoff unterscheiden sich um ca. 10 % voneinander. Gut erkennbar sind die entgegengesetzten Verläufe von Rußkonzentration und dem gesamten Luftmassenstrom jeweils in Abhängigkeit von der Filterfläche in den Abbildungen 4.40 und 4.41.

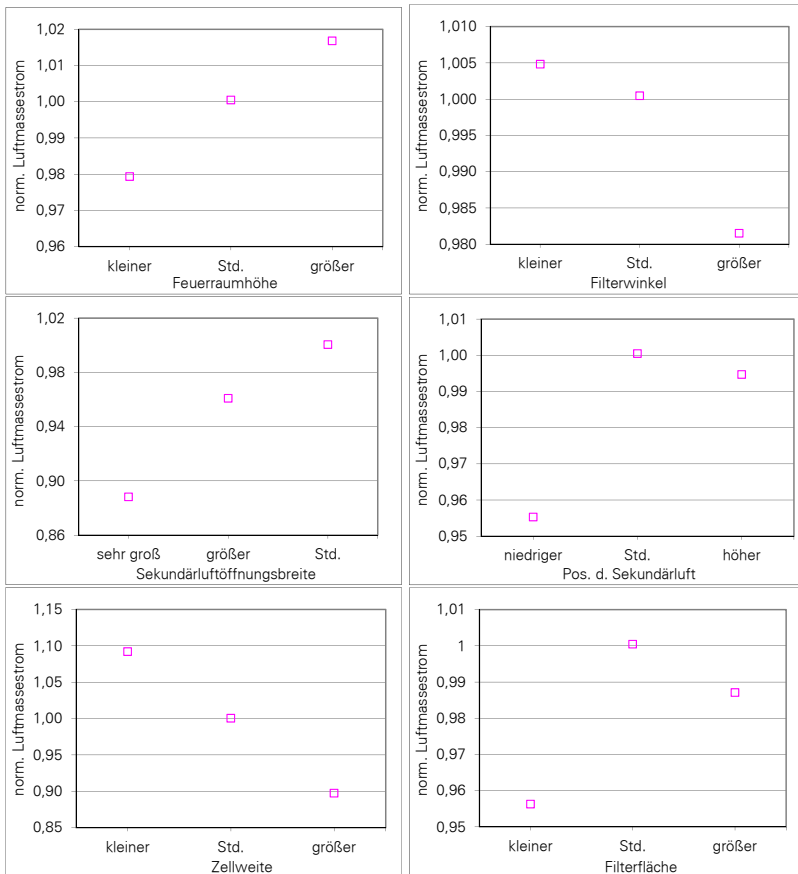


Abbildung 4.41: Luftmassenstrom (gesamt) in Abhängigkeit der gewählten Parameter für die Luftkonfiguration „freier Zug“

Der gesamte Luftmassenstrom ist im Falle der Zwangsbelüftung unabhängig von den Parametern, weshalb in Abbildung 4.41 nur die Ergebnisse der Konfiguration „freier Zug“ angegeben werden. In der gleichen Abbildung kann die Abnahme des Luftmassenstromes mit größerer Zellweite und größerem Filterwinkel sowie die Zunahme bei steigender Feuerraumhöhe und steigender Sekundärluftöffnungsbreite erkannt werden.

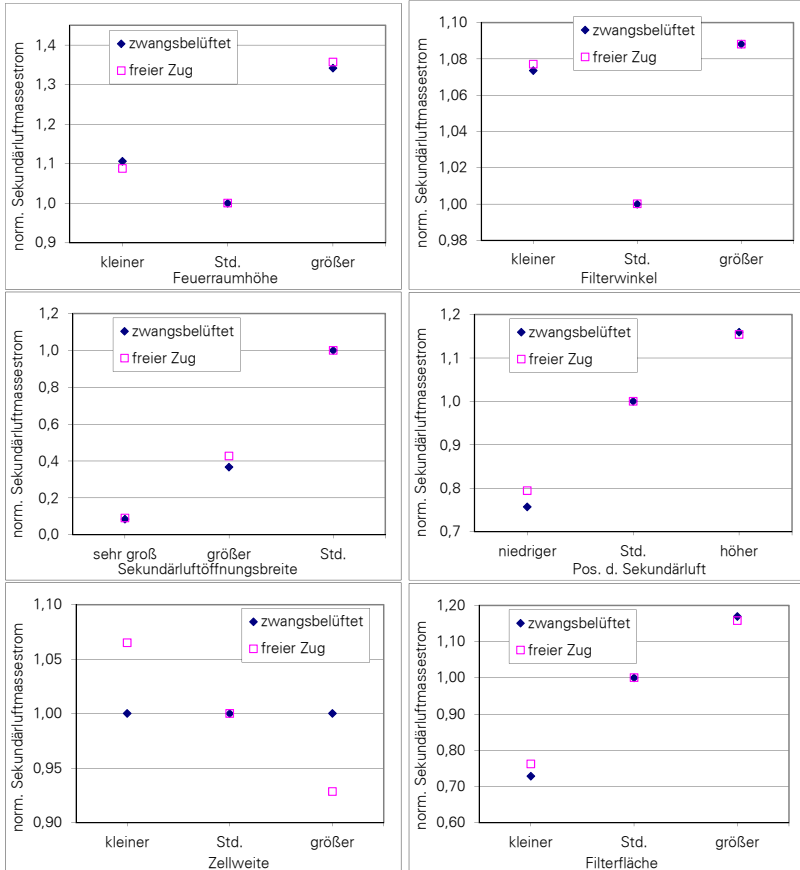


Abbildung 4.42: Sekundärluftmassenstrom in Abhängigkeit von Feuerraumhöhe, Filterwinkel, Sekundärluftöffnungsbreite, Position der Sekundärluft, Zellweite und Filterfläche

Abbildung 4.42 zeigt die sinkenden Sekundärluftmassenströme bei kleiner werdender Sekundärluftöffnungsbreite und deren Zunahme mit steigender Filterfläche sowie größerer Position der Sekundärluftzufuhr.

Die Komplexität der Ergebnisse erschwert die Diskussion und Auswertung der Parameterstudie, besonders wenn keine stetigen Verläufe beziehungsweise klare Tendenzen sichtbar sind. Aus diesem Grund wurden für die nachfolgende Zusammenfassung nur ausgewählte Berechnungsergebnisse berücksichtigt, die einen klaren Trend erkennen lassen. Die Einflüsse der Parameter auf die Zielgrößen werden in Bild 4.43 gezeigt.

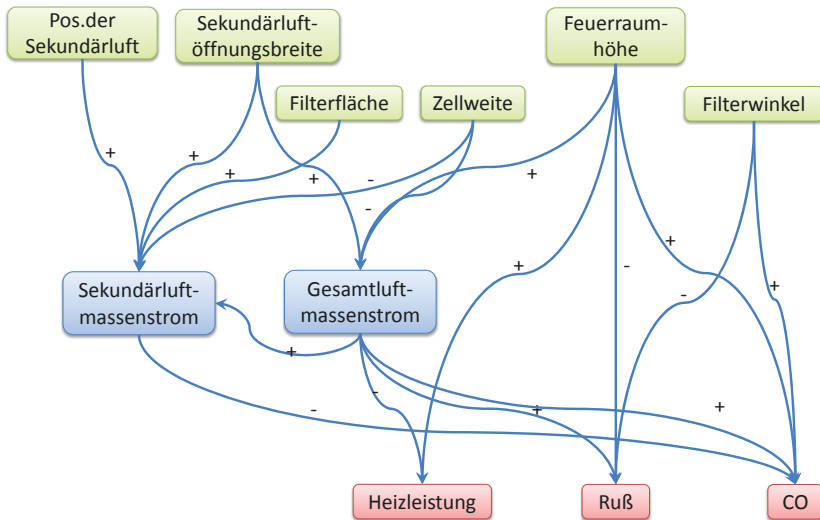


Abbildung 4.43: Einflüsse der geometrischen Parameter (grün gezeichnet) auf Luftmassenströme (Sekundär und Gesamt) und Zielgrößen Heizleistung sowie Ruß- und Kohlenmonoxidkonzentrationen. „+“ bedeutet Erhöhung bei größerem Ausgangswert, „-“ stellt eine Verringerung bei größerem Ausgangswert dar.

Viele der beschriebenen Zusammenhänge zwischen den geometrischen Veränderungen und den Ergebnissen lassen sich demnach auf eine Veränderung der Luftzufuhr, der inneren Luftverteilung (beziehungsweise der Sekundärluftzufuhr) und der Größe der Außenoberfläche zurückführen. **Die Variation der geometrischen Parameter ist demnach eine indirekte Luftmassenstromsteuerung und kann mit großer Wahrscheinlichkeit auch durch eine direkte Luftmassenstromsteuerung beziehungsweise -regelung erreicht werden.** Niedrige Gesamtluftmassenströme führen zu hohen Heizleistungen, aber auch höheren Kohlenmonoxid- und Rußkonzentrationen. Niedrige Sekundärluftmassenströme resultieren in niedrigen Kohlenmonoxidkonzentrationen.

Neben dem großen Einfluss des Luftmassenstromes existiert ein untergeordnetes Optimierungsproblem: Einerseits werden für die Umwandlung von Kohlenmonoxid in Kohlendioxid hohe Temperaturen benötigt, andererseits soll so viel Energie wie möglich an die Umgebung abgeführt werden, was niedrige Temperaturen bedingt.

4.8.2 Ergebnisse der zusätzlichen numerischen Simulationen zur Untersuchung von Detailfragen

Es zeigte sich, dass die Heizleistung mit vorhandener Anheizklappe im Falle von Zwangsbelüftung minimal größer wird (um 0,2 %). Die Kohlenmonoxidkonzentration nimmt in diesem Fall allerdings deutlich ab (um 82 %). Aus Abbildung 4.44 ist ersichtlich, was der Grund dafür ist: Durch die Öffnung der Umlenkplatte strömt vermehrt Abgas durch den vorderen Bereich des Kaminofens, die Flamme legt sich nicht so stark an die Rückwand an und die Verweilzeit steigt etwas. Da der Sekundärluftmassenstrom im Fall mit Anheizklappe kleiner wird, sinkt auch die Kohlenmonoxidkonzentration und die mittlere Feuerraumtemperatur steigt um 4 K.

Im Falle von freiem Zug sinkt die Kohlenmonoxidkonzentration nicht so stark (um 56 %). Der Grund dafür ist der größere Gesamtluftmassenstrom. Für die Heizleistung stellen sich bei dieser Luftkonfiguration Werte von 4,85 kW ein, was durch den geringeren Druckverlust aufgrund der Anheizklappenöffnung erklärbar ist.

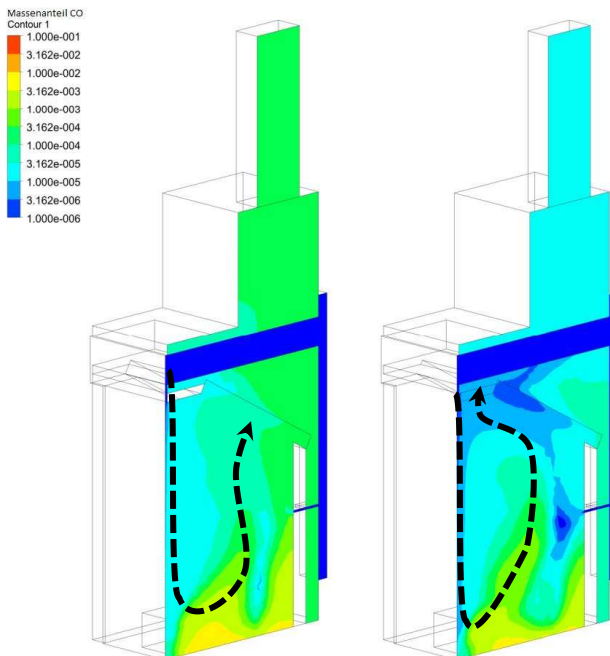


Abbildung 4.44: Verteilung des Massenanteils Kohlenmonoxid auf Schnittebene (links = Standardfall, rechts = mit Anheizöffnung)

Es muss festgehalten werden, dass über Staub- beziehungsweise Rußverteilung gerade in Anfahr- oder Abfahrprozessen noch keine experimentellen Ergebnisse vorliegen und daher keine diesbezüglichen Aussagen getroffen werden können. Laut den bisherigen Messerfahrungen kann erwartet werden, dass durch die Anheizklappe diese beiden Parameter wesentlich schlechter ausfallen und somit insgesamt keine permanent geöffnete Anheizklappe empfohlen werden kann.

Die Frage nach der Strömungsrichtung wurde durch Berechnungen beantwortet, bei denen im hinteren unteren Bereich der Feuerraumwand (Position in Abbildung 3.29 gezeigt) fünf Verbindungslöcher mit je 5 mm Durchmesser zum hinteren Abgasweg eingebracht wurden. Aus Abbildung 4.45 wird ersichtlich, dass sich dann eine Strömung aus dem Feuerraum heraus einstellt, da der Druck im Bereich der Verbrennung größer als im hinteren Abgasweg ist.

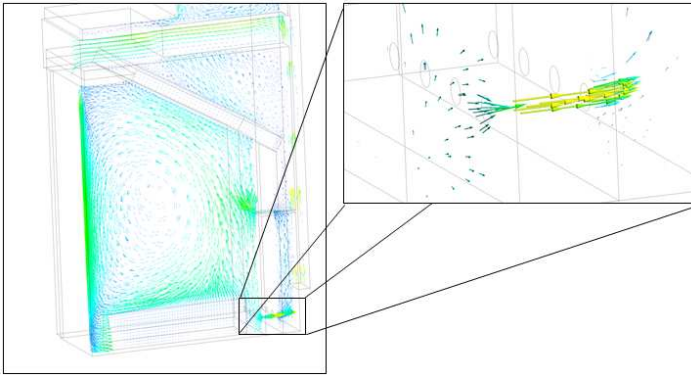


Abbildung 4.45: Verteilung der Geschwindigkeitsvektoren im Falle von Löchern in der Feuerraumwand

5 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zwei kommerziell verfügbare Kaminöfen theoretisch und experimentell untersucht. Die Experimente wurden durchgeführt, um eine Validierung der numerischen Simulationen zu ermöglichen und grundlegende Erkenntnisse über den zeitlichen Abbrand von Holzscheiten in Kaminöfen zu gewinnen und darzustellen.

Mit Hilfe der experimentellen Untersuchungen von Kaminöfen konnte die Makrokinetik des Abbrands von Holzscheiten untersucht werden. Zu diesem Zwecke wurde eine Methode zur Bestimmung der Abbrandkinetik, basierend auf Online-Messungen der Massenabnahme des Holzes sowie Offline-Messungen der Masse und Zusammensetzung von Holzscheiten, entwickelt. Für die beiden experimentell untersuchten Kaminöfen wurde eine Gleichung zur Bestimmung der Masse und Elementarzusammensetzung in Abhängigkeit von der Zeit bestimmt. Es zeigte sich, dass die energetischen und stofflichen Bilanzen bei instationärer Betrachtungsweise nicht konsistent sind und die mit verschiedenen experimentellen Methoden gewonnenen Ergebnisse voneinander abweichen.

Zur Abschätzung der Stoff- und Energieströme wurden einfache Verbrennungsmodelle der Kaminöfen erstellt, auf deren Basis die numerischen Simulationen aufbauen. Das Open-Source-Programmpaket CANTERA sowie die kommerzielle Software ANSYS CFX wurden zur Berechnung von eindimensionalen, isothermen Flammen mit detaillierten Reaktionsmechanismen angepasst und genutzt, um die Gasphasenreaktionen genauer zu untersuchen. Dabei wurde in beiden Softwarepaketen das Modell eines gradientenfreien Brennstoffeinlasses mit Hilfe eines Zwei-Zonen-Ansatzes implementiert. Es zeigte sich, dass bei stationärer Simulation und Nutzung von in der Literatur beschriebenen Reaktionsmechanismen für gasförmige Brennstoffe der Kohlenmonoxidanteil unterschätzt wird und die Messwerte ungenügend wiedergegeben werden. Ausgehend davon wurde ein 2-Schritt-Reaktionsmechanismus angepasst und in den numerischen Simulationen der Kaminöfen genutzt, der den Holzabbrand verzögert und dadurch höhere Kohlenmonoxidanteile berechnet.

Um den äußeren Wärmeübergang zu modellieren, wurde ein der Realität entsprechendes numerisches Modell des Aufstellungsraumes inklusive einer vereinfachten äußeren Form des Kaminofens erstellt. Diese Untersuchungen ergaben einen stark durch die thermische Strahlung beeinflussten, mit der Literatur vergleichbaren äußeren Wärmeübergangskoeffizienten, der in den numerischen Simulationen der Kaminöfen und der Parameterstudie verwendet wurde.

Es wurde ein numerisches Modell zur Simulation der Strömungs- und Reaktionsvorgänge in den beiden experimentell untersuchten Kaminöfen entwickelt und mit Hilfe der experimentellen Ergebnisse verglichen und validiert. Dabei fand die detailgetreue Wiedergabe der Geometrie und somit der strömungstechnischen Gegebenheiten besondere Beachtung. Die numerische Simulation kann als Grundlage für die spätere Modellierung weiterer physikalischer Vorgänge wie beispielsweise Staubentstehung und -transport und Rußreaktionen im Filter dienen. Aufgrund der komplexen Geometrie wurde auf eine zeitliche Auflösung des Abbrands verzichtet und stattdessen der stationäre Betriebsfall repräsentiert sowie ein zeitlich konstanter Brennstoffzustrom an den Holzscheitoberflächen definiert. Der Brennstoff wurde durch ein künstliches, holzäquivalentes Ersatzgas dargestellt, dessen Eigenschaften aus den experimen-

tellen Untersuchungen abgeleitet wurden. Die Reaktion dieses Ersatzgases zu Kohlenmonoxid und Wasser und damit der Sauerstoffkonsum sind somit ortsabhängig und erfüllen die Stoff- und Energiebilanzen ohne weitere Annahmen oder Vorgaben.

Die Transport- und Reaktionsprozesse der chemischen Spezies wurden mittels Transportgleichungen der Massenanteile realisiert, wobei die turbulenten Einflüsse vernachlässigt wurden. Die thermische Strahlung wurde unter Berücksichtigung der teilnehmenden Gase und des Rußanteiles berechnet. Der Filter wurde als poröser Körper mit geschwindigkeitsabhängigen Quellen- und Senkentermen in der Impulsbilanz modelliert. Eine eigene Transportgleichung ermöglicht die Berechnung der Verweilzeit beziehungsweise des Fluidalters der Luft innerhalb des Kaminofens. Die Bildung und der Transport von Stickoxiden wurden vernachlässigt. Der Einfluss der Modelle für Turbulenz, den Absorptionskoeffizienten sowie für die Reaktionskinetik wurde durch Nutzung verschiedener Ansätze herausgearbeitet und umfassend dargestellt. Die numerische Simulation erfolgte komplett innerhalb der ANSYS CFX-Umgebung unter Nutzung der CFX-eigenen Programmiersprache und ohne externe Softwarebibliotheken (weder selbst entwickelte noch frei verfügbare).

Basierend auf den Simulationen der beiden Kaminöfen wurde eine parametrische Simulation erstellt, mit welcher der Einfluss des Filters auf die Kaminöfen untersucht werden konnte. Das wichtigste Ergebnis ist, dass der Filter eine indirekte Wirkung (über den zugeführten Luftmassenstrom) auf den Kaminofen hat. Bei gleichem Luftmassenstrom (unabhängig davon, wie dieser in der Praxis realisiert wird) spielen die Einflüsse des Filters und der anderen geometrischen Parameter auf die Heizleistung eine untergeordnete Rolle. Die Kohlenmonoxidkonzentration hängt stark vom gesamten Luftmassenstrom und dem über die Sekundärluftöffnung zugeführten Luftmassenstrom ab. Als Empfehlung ergibt sich aus den numerischen Simulationen:

- Filter mit den kleinsten Poren verwenden
- Sekundärlufteinlass 15 cm über dem Rost
- mehrere kleine Sekundärluftbohrungen anstatt weniger großer
- Öffnung für gesamte Luftzufuhr sollte Durchmesser von 2-3 cm aufweisen

Verschiedene Varianten von Strömungsführung und Einbauten konnten ohne zusätzlichen Experimentieraufwand in ihrer Wirkung untersucht und miteinander verglichen werden. Dadurch konnten Detailfragen bezüglich der Konstruktion (Anheizklappe, Einfluss von Undichtigkeiten bei der Montage) diskutiert werden.

Die verwendeten Rußmodelle (Magnussen beziehungsweise Tesner) lieferten, insgesamt betrachtet, kaum validierbare Ergebnisse beziehungsweise sogar unphysikalische Resultate (Diffusion entgegen Hauptstromrichtung). Der Grund dafür ist darin zu suchen, dass bei den bisher bekannten und recherchierten Rußmodellen hauptsächlich von gasförmigen Brennstoffen ausgegangen wird. Das Rußproblem ist demnach stark mit dem verwendeten Verbrennungsmodell verknüpft, welches für eine Rußberechnung nicht geeignet scheint. Ein wesentlicher Grund besteht aber auch darin, dass kaum Messdaten vorhanden sind beziehungsweise noch Schwierigkeiten bei der Interpretation der Ergebnisse bestehen. Während der Validierungsmessungen wurde auch die Gesamtstaubmasse bestimmt, allerdings ist nicht der gesamte Staub

Ruß, sondern zum Teil auch Flugasche. Die experimentelle Untersuchung von Staub und Ruß sollte daher bei nachfolgenden Versuchen Priorität haben.

Darüber hinaus konnte durch diese rechnergestützten Simulationen der Informationsgehalt der experimentellen Untersuchungen erhöht werden. So wurde die große Schwankungsbreite des Wasseranteils und der nur indirekt bestimmbare Luftmassenstrom als wesentliche Einflussgrößen und als problematisch für den Vergleich der verschiedenen Messergebnisse erkannt. Durch die Berechnung der Verweilzeit der Luft im Kaminofen wurden Erfahrungen für eine mögliche Messung der Staub- und Rußkonzentrationen mittels Absaugsonden gewonnen. Aus der Simulation konnte die Erkenntnis gewonnen werden, dass die Heizleistung bei Verwendung einer Glasscheibe in der Tür nur unwesentlich höher ist als mit einer dünnen Blechtür. Dies ist ein Ergebnis, was so nicht erwartet wurde und anschließend durch Experimente hinterfragt und bestätigt wurde.

Schlussfolgernd daraus kann abgeleitet werden, dass eine sorgfältige Holzauswahl und Definition konstanter Testbedingungen (Luft, Wasseranteil, Holzart) die experimentellen Ergebnisse deutlich verbessern. Gerade die Ruß- und Kohlendioxidkonzentrationen sind sehr gering und reagieren daher sehr sensibel auf veränderte Messbedingungen. Eine Messgenauigkeit im Bereich von wenigen ppm ist fragwürdig, wenn die Randbedingungen (Luft, Wasseranteil Holz, Zusammensetzung Holz) um mehrere Prozentpunkte voneinander abweichen.

Am wichtigsten für weiterführende Untersuchungen ist die Berücksichtigung des instationären Verhaltens von Kaminöfen. Mit Hilfe neuer, genauerer Messmethoden sollten die zeitlich variierenden Stoff- und Energieströme bei steuerbarem Luftmassenstrom möglichst direkt bestimmt werden. Darauf aufbauend kann die Makrokinetik des Abbrands gezielt untersucht und können neue Modelle zur Nutzung in vereinfachten Verbrennungsrechnungen entwickelt werden. Mit Hilfe von instationären, numerischen Simulationen mit stark vereinfachter Geometrie sollten die schon vorhandenen Abbrand- und Zündmodelle, wie zum Beispiel Wesson et al. (1971), Bellais (2007), Saastamoinen et al. (2005) hinsichtlich ihrer Eignung in Kaminöfen getestet werden.

Eine weitere Verbesserung der Simulationen versprechen die Implementierung neuerer Strahlungsmodelle, wie beispielsweise die FSK-Methode nach Modest u. Zhang (2002) oder die Nutzung von externen Bibliotheken, wie RadCal (siehe Grosshandler (1993)) zur Berechnung der Strahlungseigenschaften.

Literaturverzeichnis

Álvarez et al. (2011)

Álvarez, L. ; Gharebaghi, M. ; Pourkashanian, M. ; Williams, A. ; Riaza, J. ; Pevida, C. ; Pis, J.J. ; Rubiera, F.: CFD modelling of oxy-coal combustion in an entrained flow reactor. In: *Fuel Processing Technology* (2011), S. 1489–1497. <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuproc.2011.03.010>. – DOI 10.1016/j.fuproc.2011.03.010

ANSYS CFX (2011)

ANSYS CFX: *ANSYS CFX Version 14 Solver Manual*, 2011

ANSYS FLUENT (2011)

ANSYS FLUENT: *ANSYS FLUENT Version 14 Documentation*, 2011

Baillifard et al. (2008)

Baillifard, Marc-André ; Casartelli, Ernesto ; Nussbaumer, Thomas: Experimental Investigation Of The Fluid Dynamics in Wood Combustion Processes. In: *16th European Biomass Conference and Exhibition, 2–6 June 2008, Valencia, Spain – Oral Presentation OA 6.4*, 2008

Bellais (2007)

Bellais, Michel: *Modelling of the pyrolysis of large wood particles*, KTH - Royal Institute of Technology, Division of Chemical Technology, Department of Chemical Engineering and Technology, Diss., 2007

Burcat u. Ruscic (2005)

Burcat, Alexander ; Ruscic, Branko: *Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with updates from Active Thermochemical Tables*. ANL-05/20 and TAE 960 Technion-IIT, Aerospace Engineering, and Argonne National Laboratory, Chemistry Division, September 2005

Bäfver et al. (2011)

Bäfver, Linda S. ; Leckner, Bo ; Tullin, Claes ; Berntsen, Morten: Particle emissions from pellets stoves and modern and old-type wood stoves. In: *Biomass and Bioenergy* Volume 35, Issue 8 (2011), S. 3648–3655

Chung et al. (1988)

Chung, Ting H. ; Ajlan, Mohammad ; Lee, Lloyd L. ; Starling, Kenneth E.: Generalized Multiparameter Correlation for Nonpolar and Polar Fluid Transport Properties. In: *Ind. Eng. Chem. Res.* 27 (4) (1988), S. 671–679. <http://dx.doi.org/10.1021/ie00076a024>. – DOI 10.1021/ie00076a024

Chung et al. (1984)

Chung, Ting H. ; Lee, Lloyd L. ; Starling, Kenneth E.: Applications of Kinetic Gas Theories and Multiparameter Correlation for Prediction of Dilute Gas Viscosity and Thermal Conductivity. In: *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 23, Issue 1 (1984), S. 8–13. <http://dx.doi.org/10.1021/i100013a002>. – DOI 10.1021/i100013a002

Dasappa et al. (1998)

Dasappa, S. ; Paul, P. J. ; Mukunda, H. S. ; Shrinivasa, U.: wood-char gasification: Experiments and analysis on single particles and packed beds. In: *Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute* Volume 27, Issue 1 (1998), S. pp. 1335–1342

Denison u. Webb (1993)

Denison, M. K. ; Webb, B. W.: A Spectral Line-Based Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model for Arbitrary RTE Solvers. In: *Journal of Heat Transfer* Volume 115, Issue 4 (1993), S. 1004 – 1012. <http://dx.doi.org/10.1115/1.2911354>. – DOI 10.1115/1.2911354

Denison u. Webb (1995)

Denison, M. K. ; Webb, B. W.: The Spectral Line-Based Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model in Nonisothermal Nonhomogeneous Media. In: *Journal of Heat Transfer* Volume 117, Issue 2 (1995), S. 359 – 365. <http://dx.doi.org/10.1115/1.2822530>. – DOI 10.1115/1.2822530

Di Blasi (2008)

Di Blasi, Colomba: Modeling chemical and physical processes of wood and biomass pyrolysis. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 34 (2008), S. 47–90

Di Blasi (2009)

Di Blasi, Colomba: Combustion and gasification rates of lignocellulosic chars. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 35 (2009), S. 121–140

Dryer u. Glassman (1973)

Dryer, F.L. ; Glassman, I.: High-temperature oxidation of CO and CH₄. In: *Symposium (International) on Combustion* Volume 14, Issue 1 (1973), S. 987–1003. [http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784\(73\)80090-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784(73)80090-6). – DOI 10.1016/S0082-0784(73)80090-6

Edwards u. Balakrishnan (1973)

Edwards, D. K. ; Balakrishnan, A.: Thermal Radiation By Combustion Gases. In: *Int. J. Heat Mass Transfer*. Vol. 16. (1973), S. pp. 25–40

Effenberger (1999)

Effenberger, Helmut: *Dampferzeugung*. Springer Berlin Heidelberg, 1999

Ertesvåg u. Magnussen (2001)

Ertesvåg, Ivar S. ; Magnussen, Bjørn F.: The Eddy Dissipation Turbulent Energy Cascade Model. In: *Comb. Sci. Tech.* 159, Issue 1 (2001), S. 213–236

Floyd et al. (2001)

Floyd, J.E. ; Baum, H.R. ; McGrattan, K.B.: A Mixture Fraction Combustion Model For Fire Simulation Using CFD. In: *International Conference on Engineered Fire Protection Design, Proceedings, 279-290 pp, 2001, 2001*

Frenklach et al. (2000)

Frenklach, Michael ; Bowman, Tom ; Smith, Greg ; Gardiner, Bill: *GRI-Mech 3.0*.

http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
Version: 2000

Galgano u. Di Blasi (2006)

Galgano, Antonio ; Di Blasi, Colomba: Coupling a CFD code with a solid-phase combustion model. In: *Progress in Computational Fluid Dynamics* Vol. 6, Nos. 4/5 (2006), S. 287 – 302

Gnielinski et al. (2006)

Gnielinski, Volker ; Kabelac, Stefan ; Kind, Matthias ; Martin, Holger ; Mewes, Dieter ; Schaber, Karlheinz ; Stephan, Peter ; Chemieingenieurwesen (GVC), VDI-Gesellschaft V. (Hrsg.): *VDI-Wärmeatlas*. Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2006, 10.Auflage

Goodwin (2003)

Goodwin, D.G.: An open-source, extensible software suite for CVD process simulation. In: Allendorf, M. (Hrsg.) ; Maury, F. (Hrsg.) ; Teyssandier, F. (Hrsg.): *Proceedings of CVD XVI and EuroCVD Fourteen*, Electrochemical Society, 2003, S. 155–162

Grosshandler (1993)

Grosshandler, W. L.: RADCAL: A Narrow-Band Model for Radiation Calculations in a Combustion Environment / NIST technical note 1402. 1993. – Forschungsbericht

Görner (1991)

Görner, Klaus: *Technische Verbrennungssysteme. Grundlagen, Modellbildung, Simulation*. Springer Verlag Berlin Heidelberg, 1991

Haseli et al. (2011)

Haseli, Y. ; Oijena, J.A. van ; Goey, L.P. H.: A Detailed one-Dimensional Model for Combustion of a Woody Biomass Particle. In: *Bioresource Technology* (2011)

Hautman et al. (1981)

Hautman, D. J. ; Dryer, F. L. ; Schug, K. P. ; Glasman, I.: A Multiple-step Overall Kinetic Mechanism for the Oxidation of Hydrocarbons. In: *Combustion Science and Technology* Volume 25, Issue 5-6 (1981), S. 219–235. <http://dx.doi.org/10.1080/00102208108547504>. – DOI 10.1080/00102208108547504

Horvat et al. (2009)

Horvat, Andrej ; Sinai, Yehuda ; Pearson, Anthony ; Most, Jean-Michel: Contribution to flashover modelling: Development of a validated numerical model for ignition of non-contiguous wood samples. In: *Fire Safety Journal* 44 (2009), S. 779–788

Hottel u. Sarofim (1967)

Hottel, H.C. ; Sarofim, A.F.: *Radiative Transfer*. McGraw Hill, New York, 1967

Howard et al. (1973)

Howard, J. B. ; Williams, G. C. ; Fine, D. H.: Kinetics of Carbon Monoxide Oxidation in Postflame Gases. In: *Symposium (International) on Combustion* Volume 14, Issue 1 (1973), S. 975–986

Jones u. Lindstedt (1988)

Jones, W. P. ; Lindstedt, R. P.: Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion. In: *Combustion and Flame* Vol. 73, No. 3. (1988), S. 233–249. [http://dx.doi.org/doi:10.1016/0010-2180\(88\)90021-1](http://dx.doi.org/doi:10.1016/0010-2180(88)90021-1). – DOI doi:10.1016/0010-2180(88)90021-1

Kaltschmitt et al. (2009)

Kaltschmitt, Martin ; Hartmann, Hans ; Hofbauer, Hermann ; Kaltschmitt, Martin (Hrsg.) ; Hartmann, Hans (Hrsg.) ; Hofbauer, Hermann (. (Hrsg.): *Energie aus Biomasse - Grundlagen, Techniken und Verfahren*. 2., neu bearb. u. erw. Auflage. Springer-Verlag, 2009

Kays (1994)

Kays, William M.: Turbulent Prandtl Number-Where Are We? In: *J. Heat Transfer* Volume 116, Issue 2 (1994), May, S. 284. <http://dx.doi.org/10.1115/1.2911398>. – DOI 10.1115/1.2911398

Kee et al. (2003)

Kee, Robert J. ; Coltrin, Michael E. ; Glarborg, Peter: *Chemically Reacting Flow - Theory and Practice*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2003

Klasen u. Görner (1998)

Klasen, Thomas ; Görner, K.: Simulation und Optimierung einer Müllverbrennungsanlage. In: *VDI-Tagung: "Modellierung und Simulation von Dampfzeugern und Feuerungen"*, Braunschweig 1998, VDI-Bericht Nr. 1390, S. 227-241, 1998

Klason u. Bai (2007)

Klason, T. ; Bai, X.S.: Computational study of the combustion process and NO formation in a small-scale wood pellet furnace. In: *Fuel* 86 (2007), S. 1465–1474

Kobayashi et al. (2009)

Kobayashi, Nobusuke ; Tanaka, Miku ; Piao, Guilin ; Kobayashi, Jun ; Hatano, Shigenobu ; Itaya, Yoshinori ; Mori, Shigekatsu: High temperature air-blown woody biomass gasification model for the estimation of an entrained down-flow gasifier. In: *Waste Management* 29 (2009), S. 245–251

Koyuncu u. Pinar (2007)

Koyuncu, T. ; Pinar, Y.: The emissions from a space-heating biomass stove. In: *Biomass and Bioenergy* Volume 31, Issue 1 (2007), S. 73–79

Lautenberger (2002)

Lautenberger, Christopher W.: *CFD Simulation Of Soot Formation And Flame Radiation*, Worcester Polytechnic Institute, Diplomarbeit, 2002

Lecheler (2009)

Lecheler, Stefan: *Numerische Strömungsberechnung - Schneller Einstieg durch ausführliche praxisrelevante Beispiele*. Vieweg+ Teubner, GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden 2009, 2009

Leiser (2011)

Leiser, Simon: *Numerical Simulation of Oxy-fuel Combustion*, Fakultät Energie-, Verfahrens- und Biotechnik, Universität Stuttgart, Diss., 2011

Lockwood et al. (1986)

Lockwood, F.C. ; Rizvi, S.M.A. ; Shah, N.G.: Comparative predictive experience of coal firing. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers 1847-1996* 200, Number C2 (1986), S. 79–87

Lockwood u. Shah (1981)

Lockwood, F.C. ; Shah, N.G.: A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures. In: *Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute* Volume 18, Issue 1 (1981), S. 1405–1414. [http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784\(81\)80144-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784(81)80144-0). – DOI 10.1016/S0082-0784(81)80144-0. – Eighteenth Symposium (International) on Combustion

Lu et al. (2008)

Lu, Hong ; Robert, Warren ; Peirce, Gregory ; Ripa, Bryan ; Baxter, Larry L.: Comprehensive Study of Biomass Particle Combustion. In: *Energy & Fuels* 22 (2008), S. 2826–2839

Magnussen u. Hjertager (1976)

Magnussen, B. F. ; Hjertager, B. H.: On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In: *16th Symp. (Int.) on Combustion, Combustion Institute, Pittsburg, Pennsylvania, pp.719-729*, 1976

Magnussen (1989)

Magnussen, Bjørn F.: Modeling of NO_x and soot formation by the Eddy Dissipation Concept. In: *Int.Flame Research Foundation, 1st topic Oriented Technical Meeting, Amsterdam, Holland, 17-19 Oct.*, 1989

Magnussen (2005)

Magnussen, Bjørn F.: The Eddy Dissipation Concept. In: *ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion (Invited lecture), Lisboa, 21-24 June*, 2005

Mangani (2008)

Mangani, Luca: *Development and Validation of an Object Oriented CFD Solver for Heat Transfer and Combustion Modeling in Turbomachinery Applications*, Università degli Studi di Firenze, Diss., 2008

Menghini et al. (2008)

Menghini, D. ; Marra, F.S. ; Allouis, C. ; Beretta, F.: Effect of excess air on the optimization of heating appliances for biomass combustion. In: *Experimental Thermal and Fluid Science* 32 (2008), S. 1371–1380

Menghini et al. (2007)

Menghini, Daniela ; Marchione, Teresa ; Martino, Giulio ; Marra, Francesco S. ; Allouis, Christophe ; Beretta, Federico: Numerical and experimental investigations

to lower environmental impact of an open fireplace. In: *Experimental Thermal and Fluid Science* 31 (2007), S. 477–482

Menter (1994)

Menter, F.R.: Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. In: *AIAA Journal* Vol. 32, No. 8 (1994), S. 269–289

Miltner et al. (2007)

Miltner, Martin ; Miltner, Angela ; Harasek, Michael ; Friedl, Anton: Process simulation and CFD calculations for the development of an innovative baled biomass-fired combustion chamber. In: *Applied Thermal Engineering* Volume 27, Issue 7 (2007), S. 1133–1224

Modest (1991)

Modest, F. M.: The Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model for Arbitrary Solution Methods in Radiative Transfer. In: *Journal of heat transfer* 113 (1991), S. 650–656

Modest (2001)

Modest, Michael F.: *Radiative Heat Transfer*. Second Edition. Academic Press, An imprint of Elsevier Science, 2001

Modest u. Zhang (2002)

Modest, Michael F. ; Zhang, Hongmei: The Full-Spectrum Correlated-k Distribution for Thermal Radiation From Molecular Gas-Particulate Mixtures. In: *Journal of Heat Transfer* Volume 124, Issue 1 (2002), S. 30–38

Müller u. Erhard (1999)

Müller, Ulrich ; Erhard, Peter: *Freie Konvektion und Wärmeübertragung*. 1. Auflage. C.F. Müller Verlag, 1999

Novozhilov (2001)

Novozhilov, V.: Computational fluid dynamics modeling of compartment fires. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 27 (2001), S. 611–666

Novozhilov et al. (1996)

Novozhilov, V. ; Moghtaderi, B. ; Fletcher, D. F. ; Kent, J. H.: Computational Fluid Dynamics Modelling of Wood Combustion. In: *Fire Safety Journal* 27 (1996), S. 69–84

Pierrot et al. (1999)

Pierrot, Laurent ; Rivière, Philippe ; Soufiani, Anouar A.ani ; Taine, Jean: A fictitious-gas-based absorption distribution function global model for radiative transfer in hot gases. In: *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* 62 (1999), S. 609–624

Poling et al. (2001)

Poling, Bruce E. ; Prausnitz, John M. ; O'Connell, John P.: *The Properties of Gases and Liquids*. McGraw Hill, 2001, Fifth Edition

Pope (2000)

Pope, Stephen B.: *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000

Porteiro et al. (2006)

Porteiro, J. ; Míguez, J.L. ; Granada, E. ; Moran, J.C.: Mathematical modelling of the combustion of a single wood particle. In: *Fuel Processing Technology* 87 (2006), S. 169 – 175

Porteiro et al. (2009)

Porteiro, Jacobo ; Collazo, Joaquin ; Patin, David ; Granada, Enrique ; Moran, Gonzalez Jorge C. ; Míguez, José L.: Numerical Modeling of a Biomass Pellet Domestic Boiler. In: *Energy & Fuels* 23 (2009), S. 1067–1075

Reynolds (1975)

Reynolds, A.J.: The prediction of turbulent Prandtl and Schmidt numbers. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 18 (1975), Nr. 9, 1055 - 1069. [http://dx.doi.org/10.1016/0017-9310\(75\)90223-9](http://dx.doi.org/10.1016/0017-9310(75)90223-9). – DOI 10.1016/0017-9310(75)90223-9. – ISSN 0017-9310

Rothman et al. (2009)

Rothman, L. S. ; Gordon, I. E. ; Barber, A. ; Benner ; Bernath, P. F. ; Birk, M. ; Boudon, V. ; Brown, L. R. ; Campargue, A. ; Champion, J. P.: The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database. In: *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 110, Issue 9-10 (2009), 533-572. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2009.02.013>. – DOI 10.1016/j.jqsrt.2009.02.013. – ISSN 00224073

Rothman et al. (2010)

Rothman, L. S. ; Gordon, I. E. ; Barber, A. ; Dothe, H. ; Gamache, R. R. ; Goldman, A. ; Perevalov, V. I. ; Tashkun, S. A. ; Tennyson, J.: HITEMP, the High-Temperature Molecular Spectroscopic Database. In: *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 111, Issue 15 (2010), S. 2139–2150. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2010.05.001>. – DOI 10.1016/j.jqsrt.2010.05.001. – ISSN 00224073

Saastamoinen et al. (2005)

Saastamoinen, J. ; Tuomaala, P. ; Paloposki, T. ; Klobut, K.: Simplified dynamic model for heat input and output of heat storing stoves. In: *Applied Thermal Engineering* 25 (2005), S. 2878–2890

Saastamoinen u. Richard (1996)

Saastamoinen, Jaakko ; Richard, Jean-Robert: Simultaneous Drying and Pyrolysis of Solid Fuel Particles. In: *Combustion and Flame* 106 (1996), S. 288–300

Saastamoinen (2003)

Saastamoinen, J.J.: NO_x Formation In Grate Combustion Of Wood. In: *Clean air* Volume 4 / Issue 3 (2003), S. 52–82

Scharler et al. (2011)

Scharler, Robert ; Benesch, Claudia ; Obernberger, Ingwald: CFD-Simulationen

als innovatives Werkzeug für die Entwicklung und Optimierung von BiomasseKleinfeuerungsanlagen und Kaminöfen / BIOS Bioenergiesysteme GmbH, Institute für Prozess- und Partikeltechnik Technische Universität Graz. 2011. – Forschungsbericht

Scharler u. Obernberger (2000)

Scharler, Robert ; Obernberger, Ingwald: Numerical Modelling of Biomass Grate Furnaces. In: *Proceedings of the 5th European Conference on Industrial Furnaces and Boilers, April 2000, Porto, Portugal*, 2000

Schneider (2003)

Schneider, Martin: *Experimentelle und mathematische Modellierung der Festbettvergasung am Beispiel der Gleichstromvergasung von Holzhackschnitzeln - ein Beitrag zur Erhöhung der Prozeßtransparenz*, Technische Universität Dresden, Diss., 2003

Schrader (2001)

Schrader, Mila: *Gusseisenöfen und Küchenherde - Geschichte, Technik, Faszination. Ein historischer Rückblick*. Edition :Anderweit, 2001

Siegel et al. (1993)

Siegel, Robert ; Howell, John R. ; Lohrengel, Joachim: *Wärmeübertragung durch Strahlung, Teil 3 - Strahlungsübergang in absorbierenden, emittierenden und streuenden Medien*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1993

Smith et al. (1982)

Smith, T.F. ; Shen, Z.F. ; Friedman, J.N.: Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Mode. In: *Journal of Heat Transfer* 104 (1982), August, S. 602–608. <http://dx.doi.org/doi:10.1115/1.3245174>. – DOI doi:10.1115/1.3245174

Specht (1993)

Specht, Eckehard: *Kinetik der Abbaureaktionen*, Technische Universität Clausthal, Diss., 1993

Ströhle (2004)

Ströhle, Jochen: *Spectral Modelling of Radiative Heat Transfer in Industrial Furnaces*, Fakultät Energietechnik, Universität Stuttgart, Diss., 2004

T. Klason et al. (2008)

T. Klason, T. ; Bai, X.S. ; Bahador, M. ; Nilsson, T.K. ; Sundén, B.: Investigation of radiative heat transfer in fixed bed biomass furnaces. In: *Fuel* 87 87 (2008), S. 2141–2153

Tabet et al. (2010)

Tabet, Fouzi ; Fichet, Vincent ; Plion, Pierre: A comprehensive CFD based model for wood combustion in domestic stoves. In: *Workshop Modellierung von Biomassevergasung und -verbrennung mit Hilfe der numerischen Strömungsmechanik*, 2010

Tesner et al. (1971)

Tesner, P. A. ; Smegiriova, T. D. ; Knorre, V. G.: Kinetics of Dispersed Carbon Formation. In: *Combustion and Flame* 17 (1971), S. 253–260

Warnatz et al. (2006)

Warnatz, J. ; Maas, U. ; Dibble, R. W.: *Combustion*. 4th edition. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006

Wesson et al. (1971)

Wesson, H. R. ; Welker, J. R. ; Slipecevich, C. M.: The Piloted Ignition of Wood by Thermal Radiation. In: *Combustion & Flame* 16 (1971), S. 303–310

Westbrook u. Dryer (1981)

Westbrook, Charles K. ; Dryer, Frederick L.: Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames. In: *Combustion Science and Technology* 27 (1981), S. 31–43

Wolf (2005)

Wolf, Christian: *Erstellung eines Modells der Verbrennung von Abfall auf Rostsystemen unter besonderer Berücksichtigung der Vermischung - ein Beitrag zur Simulation von Abfallverbrennungsanlagen*, Universität Duisburg-Essen, Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Maschinenwesen, Diss., 2005

Wurzenberger et al. (2002)

Wurzenberger, Johann C. ; Wallner, Susanne ; Raupenstrauch, Harald: Thermal Conversion of Biomass: Comprehensive Reactor and Particle Modeling. In: *AIChE Journal* 48, No.10 (2002), S. 2398–2411

Yan u. Holmstedt (1996)

Yan, Zhenghua ; Holmstedt, Göran: CFD and Experimental Studies of Room Fire Growth on Wall Lining Materials. In: *Fire Safety Journal* 27 (1996), S. 201–238

Yang et al. (2011)

Yang, Peizhong ; Tan, Xun ; Xin, Wang: Experimental study and numerical simulation for a storehouse fire accident. In: *Building and Environment* 46 (2011), S. 1445–1459

Yang et al. (2008)

Yang, Yao B. ; Sharifi, Vida N. ; Swithenbank, Jim ; Ma, Lin ; Darvell, Leilani I. ; Jones, Jenny M. ; Pourkashanian, Mohamed ; Williams, Alan: Combustion of a Single Particle of Biomass. In: *Energy & Fuels* 22 (2008), S. 306–316

Yang et al. (2003)

Yang, Y.B. ; Yamauchi, H. ; Nasserzadeh, V. ; Swithenbank, J.: Effects of fuel devolatilisation on the combustion of wood chips and incineration of simulated municipal solid wastes in a packed bed. In: *Fuel* 82 (2003), S. 2205–2221

Yeoh u. Yuen (2009)

Yeoh, Guan H. ; Yuen, Kwok K.: *Computational Fluid Dynamics in Fire Engineering Theory, Modelling and Practice*. Butterworth-Heinemann, An imprint of Elsevier, 2009

Yin et al. (2010)

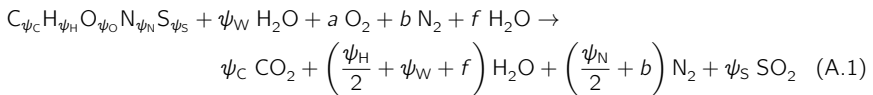
Yin, Chungun ; Johansen, Lars C. R. ; Rosendahl, Lasse A. ; Kær, Søren K.: New

Weighted Sum of Gray Gases Model Applicable to Computational Fluid Dynamics (CFD) Modeling of Oxy-Fuel Combustion: Derivation, Validation, and Implementation. In: *Energy Fuels* 2010, 24, 24 (2010), S. 6275–6282. <http://dx.doi.org/10.1021/ef101211p>.
– DOI 10.1021/ef101211p

A Gleichungen für Verbrennungsrechnungen

A.1 Stöchiometrischer Luftbedarf und maximaler Kohlendioxidanteil

Der maximale molare Kohlendioxidanteil $\psi_{\text{CO}_2, \text{max, tr}}$ (im trockenen Abgas) beziehungsweise $\psi_{\text{CO}_2, \text{max, f}}$ (im feuchten Abgas) ist der Stoffmengenanteil von Kohlendioxid bei einer vollständigen und vollkommenen Verbrennung des Brennstoffes. Ausgehend von einem Stoff mit gegebener Elementarzusammensetzung können die Massenanteile der Elemente C, H, O, N, S und Wasser in Stoffmengenanteile (ψ_{C} , ψ_{H} , ψ_{O} , ψ_{N} , ψ_{S} und ψ_{W}) umgewandelt und die Reaktionsgleichung



kann aufgestellt werden. Es wird dabei von einer vollständigen und vollkommenen Umsetzung des Kohlenstoffs ausgegangen und die Asche vernachlässigt. Daraus resultiert die Annahme, dass kein Kohlendioxid und kein NO_x entsteht. Das in der Luft vorkommende Edelgas Argon (1 Vol-%) hat keinen Einfluss auf den maximalen molaren Sauerstoffanteil und kann unberücksichtigt bleiben. Aus der Elementarbilanz für Sauerstoff lassen sich die stöchiometrischen Koeffizienten für Sauerstoff zu

$$a = \psi_{\text{C}} + \frac{\psi_{\text{H}}}{4} + \psi_{\text{S}} - \frac{\psi_{\text{O}}}{2} + \left(\frac{\psi_{\text{W}}}{2} - \frac{\psi_{\text{W}}}{2} \right), \quad (\text{A.2})$$

für Stickstoff zu

$$b = \frac{79}{21} \cdot a \quad (\text{A.3})$$

und für die Luftfeuchte mit

$$f = b \cdot \frac{\varphi_{\text{Luft, H}_2\text{O}}}{79 \cdot (1 - \varphi_{\text{Luft, H}_2\text{O}})} \cdot 100 = \frac{79}{21} \cdot a \cdot \frac{\varphi_{\text{Luft, H}_2\text{O}}}{79 \cdot (1 - \varphi_{\text{Luft, H}_2\text{O}})} \cdot 100 = a \cdot \left(1 + \frac{79}{21} \right) \cdot \frac{\varphi_{\text{Luft, H}_2\text{O}}}{1 - \varphi_{\text{Luft, H}_2\text{O}}} \quad (\text{A.4})$$

berechnen, wobei der Stoffmengenanteil Argon ($\varphi_{\text{Ar}}=0.01$) dem von Stickstoff ($\varphi_{\text{N}_2}=0.78$) zugeschlagen wurde. Somit kann der maximale Kohlendioxidanteil **im feuchten Abgas** zu

$$\begin{aligned} \psi_{\text{CO}_2, \text{max, f}} &= \frac{\psi_{\text{C}}}{\psi_{\text{C}} + \frac{\psi_{\text{H}}}{2} + \psi_{\text{W}} + \frac{\psi_{\text{N}}}{2} + b + f + \psi_{\text{S}}} \\ &= \frac{\psi_{\text{C}}}{(\psi_{\text{C}} + \psi_{\text{S}}) \cdot \left(\frac{100}{21} \right) + \frac{\psi_{\text{H}}}{2} + \psi_{\text{W}} + \frac{\psi_{\text{N}}}{2} + \left(\frac{\psi_{\text{H}}}{4} - \frac{\psi_{\text{O}}}{2} \right) \cdot \frac{79}{21} + \left(\psi_{\text{C}} + \frac{\psi_{\text{H}}}{4} + \psi_{\text{S}} - \frac{\psi_{\text{O}}}{2} \right) \cdot \left(\frac{100}{21} \right) \cdot \frac{\varphi_{\text{Luft, H}_2\text{O}}}{1 - \varphi_{\text{Luft, H}_2\text{O}}}} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

und **im trockenen Abgas** mit

$$\psi_{\text{CO}_2, \text{max, tr}} = \frac{\psi_{\text{C}}}{\psi_{\text{C}} + \frac{\psi_{\text{N}}}{2} + b + \psi_{\text{S}}} = \frac{\psi_{\text{C}}}{(\psi_{\text{C}} + \psi_{\text{S}}) \cdot \left(1 + \frac{79}{21} \right) + \frac{\psi_{\text{N}}}{2} + \left(\frac{\psi_{\text{H}}}{4} - \frac{\psi_{\text{O}}}{2} \right) \cdot \frac{79}{21}} \quad (\text{A.6})$$

berechnet werden. Da in der Praxis aber immer im trockenen Abgas gemessen wird, hat sich der Anteil im trockenen Abgas als Kenngröße durchgesetzt. Nachfolgend wird daher der Index „tr“ weggelassen.

Gleichung (A.6) lässt sich durch Division mit dem Stoffmengenanteil ψ_C , Vernachlässigung der Luftfeuchte und Vernachlässigung des elementaren Stickstoffes im Brennstoff in

$$\psi_{\text{CO}_2, \text{max}} = \frac{1}{1 + \frac{b}{\psi_C} + \frac{\psi_S}{\psi_C}} \quad (\text{A.7})$$

umwandeln, welche sich schließlich in die Form

$$\psi_{\text{CO}_2, \text{max}} = \frac{1}{1 + p + A \cdot (79/21)} \quad \text{mit}$$

$$p = (12/32) \cdot (\xi_S/\xi_C)$$

$$A = 1 + (m/4) - (n/2) + p \quad \text{mit} \quad m = 12 \cdot (\xi_H/\xi_C) \quad \text{und} \quad n = (12/16) \cdot (\xi_O/\xi_C) \quad (\text{A.8})$$

der DIN EN 13240 überführen lässt.

A.2 Umrechnung auf Bezugszustand

Zur Herleitung des Bezugszustandes wird das gemessene Abgas als ein Gemisch aus stöchiometrischem Abgas und gemessenem Luftüberschuss definiert, so dass sich für die Stoffmengenströme

$$\dot{n}_{\text{Abgas, Mess}} = \dot{n}_{\text{Abgas, stöch}} + \dot{n}_{\text{Luftüberschuss, Mess}} \quad (\text{A.9})$$

ergibt. Äquivalent dazu wird ein Gas mit normiertem Sauerstoffanteil als Gemisch aus stöchiometrischem Abgas und normiertem Luftüberschuss eingeführt:

$$\dot{n}_{\text{Abgas, Norm}} = \dot{n}_{\text{Abgas, stöch}} + \dot{n}_{\text{Luftüberschuss, Norm}} \quad (\text{A.10})$$

Die Umrechnung erfolgt in zwei Schritten:

1. Umrechnung des Messgases in Messgas ohne Luftüberschuss (beziehungsweise ohne Messluft), entspricht der Bestimmung des stöchiometrischen Abgasstoffmengenstromes
2. Berechnung des Stoffmengenstromes Normgas

Der Berechnung liegen weiterhin die Definitionsgleichungen des Stoffmengenanteil von Sauerstoff (ψ_{O_2}), der überschüssigen Luft im Abgas unter Messbedingungen oder unter normiertem

Sauerstoffanteil ($\psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas, Mess}}$ oder $\psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas, Norm}}$) sowie des Anteils an Sauerstoff in Luft (trockene Luft, der Wasseranteil wird vernachlässigt)

$$\begin{aligned}\psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Mess}} &= \frac{\dot{n}_{\text{O}_2, \text{Mess}}}{\dot{n}_{\text{Abgas, Mess}}} & \psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Norm}} &= \frac{\dot{n}_{\text{O}_2, \text{Norm}}}{\dot{n}_{\text{Abgas, Norm}}} \\ \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas, Mess}} &= \frac{\dot{n}_{\text{Luftüberschuss, Mess}}}{\dot{n}_{\text{Abgas, Mess}}} \\ \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas, Norm}} &= \frac{\dot{n}_{\text{Luftüberschuss, Norm}}}{\dot{n}_{\text{Abgas, Norm}}} \\ \text{mit } \frac{\dot{n}_{\text{O}_2, \text{Mess}}}{\dot{n}_{\text{Luftüberschuss, Mess}}} &= 0,21\end{aligned}\quad (\text{A.11})$$

zugrunde.

Der erste Schritt lässt sich durch Einsetzen von Gleichung (A.11) in Gleichung (A.9) erreichen:

$$\begin{aligned}\dot{n}_{\text{Abgas, stöch}} &= \dot{n}_{\text{Abgas, Mess}} - \dot{n}_{\text{Luftüberschuss, Mess}} = \dot{n}_{\text{Abgas, Mess}} - \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas, Mess}} \cdot \dot{n}_{\text{Abgas, Mess}} \\ &= \dot{n}_{\text{Abgas, Mess}} - \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas, Mess}} \cdot \frac{\dot{n}_{\text{O}_2, \text{Abgas, Mess}}}{\psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Mess}}} = \dot{n}_{\text{Abgas, Mess}} - \frac{\dot{n}_{\text{O}_2, \text{Abgas, Mess}}}{0,21}.\end{aligned}\quad (\text{A.12})$$

Letzteres kann auch vereinfacht dargestellt werden. Die Division durch den gesamten Stoffmengenstrom des gemessenen Gases ($\dot{n}_{\text{Abgas, Mess}}$) liefert

$$\frac{\dot{n}_{\text{Abgas, stöch}}}{\dot{n}_{\text{Abgas, Mess}}} = \frac{\dot{n}_{\text{Abgas, Mess}}}{\dot{n}_{\text{Abgas, Mess}}} - \frac{\dot{n}_{\text{O}_2, \text{Mess}}}{\dot{n}_{\text{Abgas, Mess}} \cdot 0,21} = 1 - \frac{\psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Mess}}}{0,21}.\quad (\text{A.13})$$

Im zweiten Schritt wird der so berechnete stöchiometrische Abgasstoffmengenstrom ($\dot{n}_{\text{Abgas, stöch}}$) in die Gleichung (A.10) eingesetzt, woraus

$$\begin{aligned}\dot{n}_{\text{Abgas, Norm}} &= \dot{n}_{\text{Abgas, Mess}} - \frac{\dot{n}_{\text{O}_2, \text{Mess}}}{0,21} + \dot{n}_{\text{Luftüberschuss, Norm}} \\ \dot{n}_{\text{Abgas, Norm}} &= \dot{n}_{\text{Abgas, Mess}} - \frac{\dot{n}_{\text{O}_{2\text{A}} \text{ bgas Mess}}}{0,21} + \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas, Norm}} \cdot \dot{n}_{\text{Abgas, Norm}} \\ \dot{n}_{\text{Abgas, Norm}} (1 - \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas, Norm}}) &= \dot{n}_{\text{Abgas, Mess}} - \frac{\dot{n}_{\text{O}_2, \text{Mess}}}{0,21} \\ \dot{n}_{\text{Abgas, Norm}} &= \frac{\dot{n}_{\text{Abgas, Mess}}}{1 - \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas, Norm}}} - \frac{\dot{n}_{\text{O}_2, \text{Mess}}}{0,21 \cdot (1 - \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas, Norm}})} \\ \dot{n}_{\text{Abgas, Norm}} &= \frac{\dot{n}_{\text{Abgas, Mess}}}{1 - \frac{\psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Norm}}}{0,21}} - \frac{\dot{n}_{\text{O}_2, \text{Mess}}}{0,21 \cdot (1 - \frac{\psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Norm}}}{0,21})} \\ \dot{n}_{\text{Abgas, Norm}} &= \frac{0,21 \cdot \dot{n}_{\text{Abgas, Mess}} - \dot{n}_{\text{O}_2, \text{Mess}}}{0,21 - \psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Norm}}}\end{aligned}\quad (\text{A.14})$$

resultiert. Das Verhältnis von $\dot{n}_{\text{Abgas,Mess}}/\dot{n}_{\text{Abgas,Norm}}$ stellt den Umrechnungsfaktor von jeder beliebigen Messgröße auf die entsprechende normierte Größe dar.

$$\begin{aligned}\frac{\dot{n}_{\text{Abgas,Mess}}}{\dot{n}_{\text{Abgas,Norm}}} &= \frac{\dot{n}_{\text{Abgas,Mess}}}{\frac{0,21 \cdot \dot{n}_{\text{Abgas,Mess}} - \dot{n}_{\text{O}_2,\text{Mess}}}{0,21 - \psi_{\text{O}_2,\text{Norm}}}} \\ \frac{\dot{n}_{\text{Abgas,Mess}}}{\dot{n}_{\text{Abgas,Norm}}} &= \frac{\dot{n}_{\text{Abgas,Mess}} \cdot (0,21 - \psi_{\text{O}_2,\text{Abgas,Norm}})}{0,21 \cdot \dot{n}_{\text{Abgas,Mess}} - \dot{n}_{\text{O}_2,\text{Mess}}} \\ \frac{\dot{n}_{\text{Abgas,Mess}}}{\dot{n}_{\text{Abgas,Norm}}} &= \frac{0,21 - \psi_{\text{O}_2,\text{Abgas,Norm}}}{0,21 - \frac{\dot{n}_{\text{O}_2,\text{Mess}}}{\dot{n}_{\text{Abgas,Mess}}}} \\ \frac{\dot{n}_{\text{Abgas,Mess}}}{\dot{n}_{\text{Abgas,Norm}}} &= \frac{0,21 - \psi_{\text{O}_2,\text{Abgas,Norm}}}{0,21 - \psi_{\text{O}_2,\text{Abgas,Mess}}}\end{aligned}\quad (\text{A.15})$$

Da die umzurechnenden Größen auf die Stoffmenge oder Masse bezogen sind, ist das Verhältnis von Messgröße/Normgröße reziprok zu $\dot{n}_{\text{Abgas,Mess}}/\dot{n}_{\text{Abgas,Norm}}$, so dass gilt:

$$\text{Normgröße} = \text{Messgröße} \cdot \frac{0,21 - \psi_{\text{O}_2,\text{Abgas,Norm}}}{0,21 - \psi_{\text{O}_2,\text{Abgas,Mess}}}\quad (\text{A.16})$$

Daraus ergibt sich die in DIN EN 13240 angegebene Gleichung

$$\psi_{\text{CO},\text{Abgas,Norm}} = \psi_{\text{CO},\text{Abgas,Mess}} \cdot \frac{0,21 - \psi_{\text{O}_2,\text{Abgas,Norm}}}{0,21 - \psi_{\text{O}_2,\text{Abgas,Mess}}}\quad (\text{A.17})$$

für die Umrechnung des mittleren gemessenen CO-Anteils in den normierten Bezugszustand.

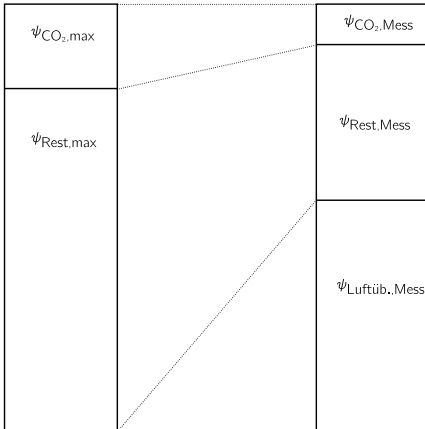


Abbildung A.1: Veranschaulichung der Zusammenhänge bei Luftüberschuss im Abgas

In der DIN EN 13240 wird eine alternative Umrechnung angegeben, die benutzt werden soll, falls bei der Abgasmessung kein Sauerstoffsensord, sondern ein Kohlendioxid-sensord zum Einsatz kommt. In diesem Fall muss der gemessene Stoffmengenanteil von Sauerstoff ($\psi_{\text{O}_2,\text{Abgas,Mess}}$) in Gleichung (A.16) beziehungsweise Gleichung (A.17) durch den im Abgas gemessenen Kohlendioxidanteil ($\psi_{\text{CO}_2,\text{Abgas,Mess}}$) ausgedrückt werden. In Abbildung A.1 wird verdeutlicht, dass der gemessene Kohlendioxidanteil bei Luftüberschuss als mit Luft verdünnt interpretiert wird. Das ist aber nur dann korrekt, wenn es sich um eine vollständige und vollkommene Verbrennung handelt (aller Brennstoff reagiert bis zur höchst-

ten Oxidationsstufe). Unter dieser Voraussetzung können dann Zusammenhänge zwischen Kohlendioxid- und Sauerstoffanteil in der Form

$$\frac{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, Mess}}}{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, max}}} = 1 - \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas, Mess}} \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, Mess}}}{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, max}}} = 1 - \frac{\psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Mess}}}{0,21}$$

beziehungsweise

$$\psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Mess}} = 0,21 \cdot \left(1 - \frac{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, Mess}}}{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, max}}} \right) \quad (\text{A.19})$$

aufgestellt werden. Wird Gleichung (A.19) in Gleichung (A.17) eingesetzt, so kann die dabei entstehende Gleichung

$$\psi_{\text{CO, Abgas, Norm}} = \psi_{\text{CO, Abgas, Mess}} \cdot \frac{0,21 - \psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Norm}}}{0,21 - 0,21 \cdot \left(1 - \frac{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, Mess}}}{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, max}}} \right)} \quad (\text{A.20})$$

zu

$$\psi_{\text{CO, Abgas, Norm}} = \psi_{\text{CO, Abgas, Mess}} \cdot \frac{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, max}}}{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, Mess}}} \cdot \frac{0,21 - \psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Norm}}}{0,21} \quad (\text{A.21})$$

umformuliert werden. Bei unvollkommener Verbrennung unter Entstehung von Kohlenmonoxid (CO) ist diese Gleichung nicht mehr anwendbar, da der Kohlenstoff jetzt sowohl im Kohlendioxid als auch im Kohlenmonoxid enthalten sein kann. Stattdessen muss der Stoffmengenanteil Kohlenmonoxid ($\psi_{\text{CO, Mess}}$) zum Stoffmengenanteil Kohlendioxid wie in

$$\psi_{\text{CO, Abgas, Norm}} = \psi_{\text{CO, Abgas, Mess}} \cdot \frac{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, max}}}{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, Mess}} + \psi_{\text{CO, Abgas, Mess}}} \cdot \frac{0,21 - \psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Norm}}}{0,21} \quad (\text{A.22})$$

addiert werden.

Die Gleichung (A.18) kann auch genutzt werden, um den Kohlendioxidanteil

$$\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, Mess}} = \psi_{\text{CO}_2, \text{max}} \cdot \left(1 - \frac{\psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Mess}}}{0,21} \right) \quad (\text{A.23})$$

aus dem Sauerstoffanteil zu berechnen, wobei diese Gleichung nur bei vollkommener Verbrennung gilt. Ist die Verbrennung unvollkommen, so muss der Kohlendioxidanteil durch

$$\psi_{\text{CO}_2, \text{Mess}} = \psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, max}} \cdot \left(1 - \frac{\psi_{\text{O}_2, \text{Abgas, Mess}}}{0,21} \right) - \psi_{\text{CO, Abgas, Mess}} \quad (\text{A.24})$$

berechnet werden.

A.3 Bestimmung des Luftverhältnisses aus Messdaten

Das Luftverhältnis λ_L charakterisiert die Verbrennungsbedingungen und ist durch

$$\lambda_L = \frac{\dot{m}_{\text{Luft}}}{\dot{m}_{\text{Luft, stöch}}} = \frac{\dot{n}_{\text{Luft}}}{\dot{n}_{\text{Luft, stöch}}} \quad (\text{A.25})$$

definiert, wobei der Index „Luft“ den tatsächlichen Luftmassenstrom spezifiziert. Eine Unterteilung wie in Anhang A.2 in normierten und gemessenen Sauerstoffanteil entfällt dadurch. Da sich der gesamte Luftstoffmengenstrom \dot{n}_{Luft} durch die unter stöchiometrischen Bedingungen zugeführte Luft und die überschüssige Luft in der Form

$$\dot{n}_{\text{Luft}} = \dot{n}_{\text{Luft,stöch}} + \dot{n}_{\text{Luftüberschuss}} \quad (\text{A.26})$$

ausdrücken lässt, ist

$$\lambda_L = \frac{\dot{n}_{\text{Luft,stöch}} + \dot{n}_{\text{Luftüberschuss}}}{\dot{n}_{\text{Luft,stöch}}} = 1 + \frac{\dot{n}_{\text{Luftüberschuss}}}{\dot{n}_{\text{Luft,stöch}}}. \quad (\text{A.27})$$

Aus Abbildung A.1 ist ableitbar, dass das Verhältnis der Stoffmengenanteile von Abgas (bestehend aus CO_2 und „Rest“) zur überschüssigen Luft gleich dem Verhältnis der Stoffmengen vom stöchiometrischen Abgas zur überschüssigen Luft gemäß

$$\frac{1 - \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas}}}{\psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas}}} = \frac{\dot{n}_{\text{Abgas,stöch}}}{\dot{n}_{\text{Luftüberschuss, Abgas}}} \quad (\text{A.28})$$

ist, wodurch sich ein Zusammenhang für den Stoffmengenstrom der überschüssigen Luft zu

$$\dot{n}_{\text{Luftüberschuss, Abgas}} = \frac{\dot{n}_{\text{Abgas,stöch}} \cdot \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas}}}{1 - \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas}}} \quad (\text{A.29})$$

und

$$\lambda_L = 1 + \frac{\dot{n}_{\text{Abgas,stöch}} \cdot \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas}}}{\dot{n}_{\text{Luft,stöch}} \cdot (1 - \psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas}})} \quad (\text{A.30})$$

ergibt.

Unter der Annahme vollkommener Verbrennung kann gemäß der Herleitung von Gleichung (A.19) der Stoffmengenanteil der überschüssigen Luft im Abgas nach

$$\psi_{\text{Luftüberschuss, Abgas}} = \left(1 - \frac{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, Mess}}}{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, max}}} \right) \quad (\text{A.31})$$

bestimmt werden, woraus

$$\lambda_L = 1 + \frac{\dot{n}_{\text{Abgas,stöch}} \cdot \left(1 - \frac{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, Mess}}}{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, max}}} \right)}{\dot{n}_{\text{Luft,stöch}} \cdot \left[1 - \left(1 - \frac{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, Mess}}}{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, max}}} \right) \right]} = 1 + \frac{\dot{n}_{\text{Abgas,stöch}}}{\dot{n}_{\text{Luft,stöch}}} \cdot \left(\frac{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, max}}}{\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas, Mess}}} - 1 \right) \quad (\text{A.32})$$

folgt. Das Verhältnis der Stoffmengenströme $\dot{n}_{\text{Abgas,stöch}}/\dot{n}_{\text{Luft,stöch}}$ kann aus dem Verhältnis der auf den Brennstoff bezogenen Stoffmengenströme nach Addition der Gleichungen (A.2) und (A.3) zu

$$\frac{\dot{n}_{\text{Luft,stöch}}}{\dot{n}_{\text{Brennstoff}}} = \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} + \psi_S - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \left(1 + \frac{79}{21} \right) \quad (\text{A.33})$$

bestimmt werden.

Es ist zu beachten, dass jeweils entweder die Größen für trockenes ($\dot{n}_{\text{Abgas,stöch,tr}}, \psi_{\text{CO}_2,\text{Abgas,max,tr}}$) oder feuchtes Abgas ($\dot{n}_{\text{Abgas,stöch,f}}, \psi_{\text{CO}_2,\text{Abgas,max,f}}$) eingesetzt werden müssen. Somit ergibt sich mit dem **feuchten Stoffmengenstrom Abgas**

$$\frac{\dot{n}_{\text{Abgas,stöch,f}}}{\dot{n}_{\text{Brennstoff}}} = \psi_C + \frac{\psi_H}{2} + \psi_W + \frac{\psi_N}{2} + \psi_S + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} + \psi_S - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21} \quad (\text{A.34})$$

oder dem **trockenen Stoffmengenstrom Abgas**

$$\frac{\dot{n}_{\text{Abgas,stöch,tr}}}{\dot{n}_{\text{Brennstoff}}} = \psi_C + \frac{\psi_N}{2} + \psi_S + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} + \psi_S - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21}. \quad (\text{A.35})$$

Mit dem maximalen Kohlendioxidanteil im Abgas nach Gleichung (A.6) beziehungsweise Gleichung (A.5) gilt damit

$$\lambda_L(\text{aus trockenem Messwert}) = \left(\frac{\psi_C + \frac{\psi_N}{2} + \psi_S + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} + \psi_S - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21}}{\left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} + \psi_S - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \left(1 + \frac{79}{21} \right)} \right) \cdot \left(\frac{\frac{\psi_C}{(\psi_C + \psi_S) \cdot \left(1 + \frac{79}{21} \right) + \frac{\psi_N}{2} + \left(\frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21}}}{\psi_{\text{CO}_2,\text{Abgas,Mess,tr}}} - 1 \right) + 1 \quad (\text{A.36})$$

beziehungsweise

$$\lambda_L(\text{aus feuchtem Messwert}) = \left(\frac{\psi_C + \frac{\psi_H}{2} + w + \frac{\psi_N}{2} + \psi_S + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} + \psi_S - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21}}{\left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} + \psi_S - \frac{o}{2} \right) \cdot \left(1 + \frac{79}{21} \right)} \right) \cdot \left(\frac{\frac{\psi_C}{(\psi_C + \psi_S) \cdot \left(1 + \frac{79}{21} \right) + \frac{\psi_H}{2} + \psi_W + \frac{\psi_N}{2} + \left(\frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21}}}{\psi_{\text{CO}_2,\text{Abgas,Mess,f}}} - 1 \right) + 1. \quad (\text{A.37})$$

A.4 Luftmassenstrom

Aus Gleichung (A.25) und Gleichung (A.33) lässt sich

$$\frac{\dot{n}_{\text{Luft}}}{\dot{n}_{\text{Brennstoff}}} = \lambda_L \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} + \psi_S - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \left(1 + \frac{79}{21} \right) \quad (\text{A.38})$$

beziehungsweise

$$\frac{\dot{n}_{\text{Luft}}}{\dot{n}_{\text{Brennstoff}}} \cdot \frac{M_{\text{Luft}}}{M_{\text{Brennstoff}}} = \frac{\dot{m}_{\text{Luft}}}{\dot{m}_{\text{Brennstoff}}} \quad (\text{A.39})$$

herleiten, woraus

$$\frac{\dot{m}_{\text{Luft}}}{\dot{m}_{\text{Brennstoff}}} = \frac{\lambda_L \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} + \psi_S - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \left(1 + \frac{79}{21} \right) \cdot (M_{\text{O}_2} \cdot \psi_{\text{O}_2, \text{Luft}} + M_{\text{N}_2} \cdot \psi_{\text{N}_2, \text{Luft}})}{M_C \cdot \psi_C + M_H \cdot \psi_H + M_O \cdot \psi_O + M_N \cdot \psi_N + M_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \psi_W} \quad (\text{A.40})$$

folgt.

A.5 Abgasmassenstrom

Das gesamte Abgas (trocken oder feucht) setzt sich aus dem stöchiometrischen Abgas und dem Luftüberschuss nach

$$\dot{n}_{\text{Abgas}} = \dot{n}_{\text{Abgas, stöch}} + \dot{n}_{\text{Luftüberschuss}} \quad (\text{A.41})$$

zusammen. Der Luftüberschuss kann nach Gleichung (A.27) durch das Luftverhältnis und den stöchiometrischen Luftüberschuss ausgedrückt werden, was zu

$$\dot{n}_{\text{Abgas}} = \dot{n}_{\text{Abgas, stöch}} + (\lambda_L - 1) \cdot \dot{n}_{\text{Luft, stöch}}, \quad (\text{A.42})$$

beziehungsweise, bezogen auf den Brennstoffstoffmengenstrom $\dot{n}_{\text{Brennstoff}}$, zu

$$\frac{\dot{n}_{\text{Abgas}}}{\dot{n}_{\text{Brennstoff}}} = \frac{\dot{n}_{\text{Abgas, stöch}}}{\dot{n}_{\text{Brennstoff}}} + (\lambda_L - 1) \cdot \frac{\dot{n}_{\text{Luft, stöch}}}{\dot{n}_{\text{Brennstoff}}} \quad (\text{A.43})$$

führt. Durch Einsetzen des Stoffmengenstromes für das **feuchte Abgas** nach Gleichung (A.34) und der auf den Brennstoff bezogenen, stöchiometrischen Stoffmenge Luft nach Gleichung (A.33) wird daraus

$$\begin{aligned} \frac{\dot{n}_{\text{Abgas, f}}}{\dot{n}_{\text{Brennstoff}}} &= \psi_C + \frac{\psi_H}{2} + \psi_W + \frac{\psi_N}{2} + \psi_S + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} + \psi_S - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21} \\ &\quad + (\lambda_L - 1) \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} + \psi_S - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \left(1 + \frac{79}{21} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

und mit **trockenem Abgas** nach Gleichung (A.35)

$$\begin{aligned} \frac{\dot{n}_{\text{Abgas, tr}}}{\dot{n}_{\text{Brennstoff}}} &= \psi_C + \frac{\psi_N}{2} + \psi_S + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} + \psi_S - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21} \\ &\quad + (\lambda_L - 1) \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} + \psi_S - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \left(1 + \frac{79}{21} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

Unter Vernachlässigung von Schwefel und weiterer mathematischer Umformung ergibt sich so

$$\frac{\dot{n}_{\text{Abgas, f}}}{\dot{n}_{\text{Brennstoff}}} = \psi_C + \frac{\psi_H}{2} + \psi_W + \frac{\psi_N}{2} + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21} + \frac{100}{21} (\lambda_L - 1) \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right) \quad (\text{A.46})$$

und

$$\frac{\dot{n}_{\text{Abgas,tr}}}{\dot{n}_{\text{Brennstoff}}} = \psi_C + \frac{\psi_N}{2} + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21} + \frac{100}{21} (\lambda_L - 1) \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right). \quad (\text{A.47})$$

Multipliziert mit der molaren Masse des feuchten Abgases $M_{\text{Abgas, f}}$ und dividiert durch die molare Masse des Brennstoffes $M_{\text{Brennstoff}}$ ergibt sich

$$\frac{\dot{n}_{\text{Abgas,f}}}{\dot{n}_{\text{Brennstoff}}} \cdot \frac{M_{\text{Abgas,f}}}{M_{\text{Brennstoff}}} = \frac{\dot{m}_{\text{Abgas,f}}}{\dot{m}_{\text{Brennstoff}}}. \quad (\text{A.48})$$

Die molaren Massen ergeben sich aus den Summen der Stoffmengenanteile der Einzelkomponenten multipliziert mit der molaren Masse der einzelnen Komponente nach

$$M_{\text{Abgas,f}} = M_{\text{CO}_2} \cdot \psi_{\text{CO}_2,\text{f}} + M_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \psi_{\text{H}_2\text{O},\text{f}} + M_{\text{O}_2} \cdot \psi_{\text{O}_2,\text{f}} + M_{\text{N}_2} \cdot \psi_{\text{N}_2,\text{f}} \quad (\text{A.49})$$

$$= M_{\text{CO}_2} \cdot \frac{\dot{n}_{\text{CO}_2}}{\dot{n}_{\text{Abgas,f}}} + M_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \frac{\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}}}{\dot{n}_{\text{Abgas,f}}} + M_{\text{O}_2} \cdot \frac{\dot{n}_{\text{O}_2}}{\dot{n}_{\text{Abgas,f}}} + M_{\text{N}_2} \cdot \frac{\dot{n}_{\text{N}_2}}{\dot{n}_{\text{Abgas,f}}} \quad (\text{A.50})$$

und

$$M_{\text{Brennstoff, normiert}} = M_C \cdot \psi_C + M_H \cdot \psi_H + M_O \cdot \psi_O + M_N \cdot \psi_N + M_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \psi_W, \quad (\text{A.51})$$

wodurch Gleichung (A.48)

$$\frac{\dot{m}_{\text{Abgas,f}}}{\dot{m}_{\text{Brennstoff}}} = \frac{M_{\text{CO}_2} \cdot \dot{n}_{\text{CO}_2} + M_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \dot{n}_{\text{H}_2\text{O}} + M_{\text{O}_2} \cdot \dot{n}_{\text{O}_2} + M_{\text{N}_2} \cdot \dot{n}_{\text{N}_2}}{\dot{m}_{\text{Brennstoff}}}$$

wird. Nach einigen weiteren Umformungen kann diese Gleichung zu

$$\begin{aligned} \frac{\dot{m}_{\text{Abgas,f}}}{\dot{m}_{\text{Brennstoff}}} &= \frac{M_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \psi_W + M_N \cdot \psi_N - ((158 \cdot M_N + 42 \cdot M_O) \cdot \lambda_L - 42 \cdot M_O) \cdot \frac{\psi_O}{42}}{M_C \cdot \psi_C + M_H \cdot \psi_H + M_O \cdot \psi_O + M_N \cdot \psi_N + M_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \psi_W} \\ &\quad + \frac{((79 \cdot M_N + 21 \cdot M_O) \cdot \lambda_L + 21 \cdot M_{\text{H}_2\text{O}} - 21 \cdot M_O) \cdot \frac{\psi_H}{42}}{M_C \cdot \psi_C + M_H \cdot \psi_H + M_O \cdot \psi_O + M_N \cdot \psi_N + M_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \psi_W} \\ &\quad + \frac{((316 \cdot M_N + 84 \cdot M_O) \cdot \lambda_L + 42 \cdot M_C) \cdot \frac{\psi_C}{42}}{M_C \cdot \psi_C + M_H \cdot \psi_H + M_O \cdot \psi_O + M_N \cdot \psi_N + M_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \psi_W} \end{aligned} \quad (\text{A.52})$$

beziehungsweise

$$\begin{aligned} \frac{\dot{m}_{\text{Abgas,tr}}}{\dot{m}_{\text{Brennstoff}}} &= \frac{M_N \cdot \psi_N - ((158 \cdot M_N + 42 \cdot M_O) \cdot \lambda_L - 42 \cdot M_O) \cdot \frac{\psi_O}{42}}{M_C \cdot \psi_C + M_H \cdot \psi_H + M_O \cdot \psi_O + M_N \cdot \psi_N + M_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \psi_W} \\ &\quad + \frac{((79 \cdot M_N + 21 \cdot M_O) \cdot \lambda_L - 21 \cdot M_O) \cdot \frac{\psi_H}{42}}{M_C \cdot \psi_C + M_H \cdot \psi_H + M_O \cdot \psi_O + M_N \cdot \psi_N + M_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \psi_W} \\ &\quad + \frac{((316 \cdot M_N + 84 \cdot M_O) \cdot \lambda_L + 42 \cdot M_C) \cdot \frac{\psi_C}{42}}{M_C \cdot \psi_C + M_H \cdot \psi_H + M_O \cdot \psi_O + M_N \cdot \psi_N + M_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \psi_W} \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

umgestellt werden.

Im Gegensatz dazu wird in DIN EN 13240 der Abgasmassenstrom nach

$$\dot{m} \left(\text{in } \frac{\text{g}}{\text{s}} \right) = \frac{\left(\frac{\xi_C - C_r}{0,536 \cdot (\psi_{\text{CO}_2, \text{Abgas}} + \psi_{\text{CO}, \text{Abgas}})} + 9 \cdot \xi_H + \xi_W \right) \cdot B \cdot 1,3}{3,6} \quad (\text{A.54})$$

mit ξ_C, ξ_H, ξ_W = Massenanteile Kohlenstoff, Wasserstoff und Wasser im Brennstoff, B = Brennstoff-Massenstrom in kg/h und C_r = Kohlenstoffanteil des Rost- und Schürdurchfalles (bezogen auf die Masse des verfeuerten Brennstoffes) berechnet. Für sehr geringe Wirkungsgradverluste aufgrund von Schürdurchfall berechnet sich dieser nach $C_r = \frac{R \cdot b}{100}$, mit R = Anteil Rost- und Schürdurchfall (bezogen auf die Masse des verfeuerten Brennstoffes) und b = Anteil brennbarer Bestandteile im Rost- und Schürdurchfall ($b = 0,005$ wenn nicht näher bekannt).

A.6 Abgaszusammensetzung

Die Stoffmengenanteile ergeben sich aus den Stoffmengenströmen (je Brennstoff) der jeweiligen Komponente, bezogen auf den gesamten (**feuchten**) Abgasstoffmengenstrom und lassen sich unter Vernachlässigung des Schwefelanteils im Brennstoff zu

$$\begin{aligned} \psi_{\text{CO}_2, f} &= \frac{\dot{n}_{\text{CO}_2, f}}{\dot{n}_{\text{Abgas}, f}} = \frac{\psi_C}{\psi_C + \frac{\psi_H + \psi_N}{2} + \psi_W + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21} + \frac{100}{21} (\lambda_L - 1) \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right)} \\ \psi_{\text{H}_2\text{O}, f} &= \frac{\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}, f}}{\dot{n}_{\text{Abgas}, f}} = \frac{\frac{\psi_H}{2} + \psi_W}{\psi_C + \frac{\psi_H + \psi_N}{2} + \psi_W + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21} + \frac{100}{21} (\lambda_L - 1) \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right)} \\ \psi_{\text{O}_2, f} &= \frac{\dot{n}_{\text{O}_2, f}}{\dot{n}_{\text{Abgas}, f}} = \frac{(\lambda - 1) \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right)}{\psi_C + \frac{\psi_H + \psi_N}{2} + \psi_W + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21} + \frac{100}{21} (\lambda_L - 1) \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right)} \\ \psi_{\text{N}_2, f} &= \frac{\dot{n}_{\text{N}_2, f}}{\dot{n}_{\text{Abgas}, f}} = \frac{\frac{\psi_N}{2} + \frac{79}{21} \cdot \lambda_L \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right)}{\psi_C + \frac{\psi_H + \psi_N}{2} + \psi_W + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21} + \frac{100}{21} (\lambda_L - 1) \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right)} \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

beziehungsweise auf den gesamten (**trockenen**) Abgasstoffmengenstrom bezogen zu

$$\begin{aligned} \psi_{\text{CO}_2, \text{tr}} &= \frac{\dot{n}_{\text{CO}_2, \text{tr}}}{\dot{n}_{\text{Abgas}, \text{tr}}} = \frac{\psi_C}{\psi_C + \frac{\psi_N}{2} + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21} + \frac{100}{21} (\lambda_L - 1) \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right)} \\ \psi_{\text{H}_2\text{O}, \text{tr}} &= \frac{\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}, \text{tr}}}{\dot{n}_{\text{Abgas}, \text{tr}}} = 0 \\ \psi_{\text{O}_2, \text{tr}} &= \frac{\dot{n}_{\text{O}_2, \text{tr}}}{\dot{n}_{\text{Abgas}, \text{tr}}} = \frac{(\lambda - 1) \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right)}{\psi_C + \frac{\psi_N}{2} + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21} + \frac{100}{21} (\lambda_L - 1) \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right)} \\ \psi_{\text{N}_2, \text{tr}} &= \frac{\dot{n}_{\text{N}_2, \text{tr}}}{\dot{n}_{\text{Abgas}, \text{tr}}} = \frac{\frac{\psi_N}{2} + \frac{79}{21} \cdot \lambda_L \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right)}{\psi_C + \frac{\psi_N}{2} + \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right) \cdot \frac{79}{21} + \frac{100}{21} (\lambda_L - 1) \cdot \left(\psi_C + \frac{\psi_H}{4} - \frac{\psi_O}{2} \right)} \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

bestimmen.

A.7 Stoffdatenfunktionen für Verbrennungsrechnungen

Für den Temperaturbereich kleiner $T = 1000\text{ K}$ können für die Enthalpie eines idealen Gases nach Burcat u. Ruscic (2005) Polynomansätze der Form

$$h_i = R \cdot \left(a_0 \cdot T + \frac{a_1}{2} \cdot T^2 + \frac{a_2}{3} \cdot T^3 + \frac{a_3}{4} \cdot T^4 + \frac{a_4}{5} \cdot T^5 + a_5 \right) \quad (\text{A.57})$$

verwendet werden. Diese Enthalpie ist bezogen auf 25° C und beinhaltet auch die Bildungsenthalpie bei 25° C , d.h., bei einer Temperatur von $T = 298,15\text{ K}$ werden die Enthalpien gleich der Standardbildungsenthalpie $\Delta \bar{h}_{f,i}^0$.

$$\begin{aligned} \text{O}_2 : a_0 &= 3,78245636E+00 & a_1 &= -2,99673415E-03 & a_2 &= 9,84730200E-06 \\ a_3 &= -9,68129508E-09 & a_4 &= 3,24372836E-12 & a_5 &= -1,06394356E+03 \end{aligned} \quad (\text{A.58})$$

$$\begin{aligned} \text{CO}_2 : a_0 &= 2,35681300E+00 & a_1 &= 8,98412990E-03 & a_2 &= -7,12206320E-06 \\ a_3 &= 2,45730080E-09 & a_4 &= -1,42885480E-13 & a_5 &= -4,83719710E+04 \end{aligned} \quad (\text{A.59})$$

$$\begin{aligned} \text{H}_2\text{O} : a_0 &= 4,19863520E+00 & a_1 &= -2,03640170E-03 & a_2 &= 6,52034160E-06 \\ a_3 &= -5,48792690E-09 & a_4 &= 1,77196800E-12 & a_5 &= -3,02937260E+04 \end{aligned} \quad (\text{A.60})$$

$$\begin{aligned} \text{N}_2 : a_0 &= 3,53100528E+00 & a_1 &= -1,23660988E-04 & a_2 &= -5,02999433E-07 \\ a_3 &= 2,43530612E-09 & a_4 &= -1,40881235E-12 & a_5 &= -1,04697628E+03 \end{aligned} \quad (\text{A.61})$$

A.8 Wirkungsgrad

Der Wirkungsgrad ist die Heizleistung bezogen auf die maximal mögliche Heizleistung, die sich aus dem Heizwertstrom nach

$$\eta = \frac{\dot{Q}}{\dot{H}_i} = \frac{\dot{H}_i - \dot{H}_{\text{Abgas}}}{\dot{H}_i} \cdot 100 \quad (\text{A.62})$$

ergibt.

In der DIN EN 13240 (mit Berichtigungen aus der DIN EN 15250) wird für den Wirkungsgrad die Berechnungsgleichung

$$\eta = 100 - q_a - q_b - q_r \quad (\text{A.63})$$

mit den Wärmeverlusten im Abgas q_a , den chemischen Verlusten im Abgas q_b und den Verlusten aufgrund von Rost- und Schürddurchfall q_r angegeben.

$$\begin{aligned}
 Q_a &= (T_{\text{Abgas}} - T_{\text{Raum}}) \cdot \left[C_{p,\text{Abgas}} \cdot \frac{\xi_C - C_r}{0,536 \cdot (\psi_{\text{CO},\text{tr}} - \psi_{\text{CO}_2,\text{tr}})} + C_{p,\text{H}_2\text{O}} \cdot 1,224 \cdot \frac{9 \cdot \xi_H + \xi_W}{100} \right] \\
 q_a &= 100 \cdot \frac{Q_a}{H_i} \\
 Q_b &= 12644 \cdot \psi_{\text{CO},\text{tr}} \cdot \frac{\xi_C - C_r}{0,536 \cdot (\psi_{\text{CO},\text{tr}} - \psi_{\text{CO}_2,\text{tr}})} \cdot 100 \\
 q_b &= 100 \cdot \frac{Q_b}{H_i} \\
 Q_r &= 335 \cdot b \cdot \frac{R}{100} \\
 q_r &= 100 \cdot \frac{Q_r}{H_i}
 \end{aligned} \tag{A.64}$$

mit ξ_C, ξ_H, ξ_W = Massenanteile Kohlenstoff, Wasserstoff und Wasser im Brennstoff, B = Brennstoff-Massenstrom in kg/h und C_r = Kohlenstoffanteil des Rost- und Schürddurchfalles (bezogen auf die Masse des verfeuerten Brennstoffes). Für sehr geringe Wirkungsgradverluste aufgrund von Schürddurchfall berechnet sich dieser nach $C_r = \frac{R \cdot b}{100}$, mit R = Anteil Rost- und Schürddurchfall (bezogen auf die Masse des verfeuerten Brennstoffes) und b = Anteil brennbarer Bestandteile im Rost- und Schürddurchfall ($b = 0,005$ wenn nicht näher bekannt).

Die Wärmekapazität des Abgases wird dabei mit

$$\begin{aligned}
 c_{p,\text{Abgas}} &= 3,6 \cdot \left[0,361 + 0,08 \cdot \left(\frac{\vartheta_{\text{Abgas}}}{1000} \right) + 0,034 \cdot \left(\frac{\vartheta_{\text{Abgas}}}{1000} \right)^2 \right. \\
 &\quad + \left(0,085 + 0,19 \cdot \left(\frac{\vartheta_{\text{Abgas}}}{1000} \right) - 0,14 \cdot \left(\frac{\vartheta_{\text{Abgas}}}{1000} \right)^2 \right) \cdot \psi_{\text{CO}_2} \\
 &\quad \left. + \left(0,3 \cdot \left(\frac{\vartheta_{\text{Abgas}}}{1000} \right) - 0,2 \cdot \left(\frac{\vartheta_{\text{Abgas}}}{1000} \right)^2 \right) \cdot (\psi_{\text{CO}_2})^2 \right] \tag{A.65}
 \end{aligned}$$

und die des Wasserdampfes mit

$$c_{p,\text{H}_2\text{O}} = 3,6 \cdot \left[0,414 + 0,038 \cdot \left(\frac{\vartheta_{\text{Abgas}}}{1000} \right) + 0,034 \cdot \left(\frac{\vartheta_{\text{Abgas}}}{1000} \right)^2 \right] \tag{A.66}$$

angegeben.

B Daten für numerische Simulationen

B.1 Thermodynamische Stoffdaten

Tabelle B.1: Verwendete Polynomkoeffizienten zur Bestimmung der Wärmekapazität, Enthalpie und Entropie in ANSYS CFX (nach Burcat u. Ruscic (2005), obere Zeile = Temperaturbereich 200 K...1000 K, untere Zeile = Temperaturbereich 1000 K...6000 K)

	a_0	a_1 in K^{-1}	a_2 in K^{-2}	a_3 in K^{-3}	a_4 in K^{-4}	a_5 in K	a_6
CO ₂	2,3568E+00	8,9841E-03	-7,1221E-06	2,4573E-09	-1,4289E-13	-4,8372E+04	9,9009E+00
	4,6365E+00	2,7415E-03	-9,9590E-07	1,6039E-10	-9,1620E-15	-4,9025E+04	-1,9349E+00
H ₂ O	4,1986E+00	-2,0364E-03	6,5203E-06	-5,4879E-09	1,7720E-12	-3,0294E+04	-8,4901E-01
	2,6770E+00	2,9732E-03	-7,7377E-07	9,4434E-11	-4,2690E-15	-2,9886E+04	6,8826E+00
CO	3,5795E+00	-6,1035E-04	1,0168E-06	9,0701E-10	-9,0442E-13	-1,4344E+04	3,5084E+00
	3,0485E+00	1,3517E-03	-4,8579E-07	7,8854E-11	-4,6981E-15	-1,4266E+04	6,0171E+00
O ₂	3,7825E+00	-2,9967E-03	9,8473E-06	-9,6813E-09	3,2437E-12	-1,0639E+03	3,6577E+00
	3,6610E+00	6,5637E-04	-1,4115E-07	2,0580E-11	-1,2991E-15	-1,2160E+03	3,4154E+00
N ₂	3,5310E+00	-1,2366E-04	-5,0300E-07	2,4353E-09	-1,4088E-12	-1,0470E+03	2,9675E+00
	2,9526E+00	1,3969E-03	-4,9263E-07	7,8601E-11	-4,6076E-15	-9,2395E+02	5,8719E+00
H ₂	2,3443E+00	7,9804E-03	-1,9478E-05	2,0157E-08	-7,3760E-12	-9,1792E+02	6,8300E-01
	2,9328E+00	8,2660E-04	-1,4640E-07	1,5410E-11	-6,8880E-16	-8,1306E+02	-1,0243E+00
CH ₄	5,1491E+00	-1,3662E-02	4,9145E-05	-4,8425E-08	1,6660E-11	-1,0247E+04	-4,6385E+00
	1,6533E+00	1,0026E-02	-3,3166E-06	5,3648E-10	-3,1470E-14	-1,0010E+04	9,9051E+00
C ₂ H ₆	4,2914E+00	-5,5015E-03	5,9944E-05	-7,0847E-08	2,6869E-11	-1,1522E+04	2,6668E+00
	4,0467E+00	1,5354E-02	-5,4704E-06	8,7783E-10	-5,2317E-14	-1,2447E+04	-9,6870E-01
C ₃ H ₈	4,2109E+00	1,7089E-03	7,0653E-05	-9,2006E-08	3,6462E-11	-1,4381E+04	5,6100E+00
	6,6692E+00	2,0611E-02	-7,3651E-06	1,1843E-09	-7,0691E-14	-1,6275E+04	-1,3194E+01

B.2 Transportgrößen

Tabelle B.2: Verwendete kritische Daten zur Bestimmung der Viskosität und Wärmeleitfähigkeit in ANSYS CFX (nach Gnielinski et al. (2006))

	\bar{v}_{krit} in cm^3/mol	T_{krit} in K
CO_2	94,8	304,3
H_2O	56	647,1
CO	94,3	132,9
O_2	73,4	154,6
N_2	89,2	126,3
H_2	65,2	33,1
CH_4	348,7	190,6
C_2H_6	617,5	305,4
C_3H_8	1037,6	369,9